Rapport de Stage Master

Master 2R - parcours Micro et Nanotechnologie

Etude des Phonons-Polaritons de Surface par spectroscopie Infrarouge de films minces de Nitrure d'Aluminium

BOUCHERTA Mohammed

Encadré par : M. SOLTANI Ali

Soutenance prévue le 10 septembre 2015 devant le jury :

Pr. P. Pernod

Pr. S. Bollaert

Dr. A. Soltani

2014-2015

REMERCIEMENTS

Je remercie Dieu qui ma donné la force, la volonté et l'espoir pour réussir ma vie.

Je tiens à remercier ici tous ceux qui ont contribué au bon déroulement de ce travail tant par leur encadrement ou leurs compétences que par leur soutien.

Je tiens naturellement à exprimer ma profonde gratitude aux membres du jury qui m'ont fait l'honneur de participer à la dernière étape de cette formation : la soutenance. Je remercie de ce fait messieurs les professeurs Philippe PERNOD, Sylvain BOLLAERT et Ali SOLTANI pour avoir accepté de siéger dans le jury.

Je tiens également à remercier Monsieur le professeur Ali SOLTANI à la fois pour son encadrement, ces conseils, sa patience de relecture du manuscrit et ses qualités pédagogiques que j'apprécie énormément.

A l'issue d'une agréable année au sein de l'Ecole Centrale de Lille, j'adresse des remerciements particuliers à toute l'équipe enseignante pour la qualité de l'enseignement qui nous a été dispensé.

Une mention spéciale à tous mes amis du M2R-MNT pour avoir su imposer une ambiance toute particulière durant cette année.

J'ai souscrit à un contrat de stage avec IEMN CNRS8520 pour une durée de 5 mois à compter du 01 avril 2015. Mon stage s'est déroulé au sein du laboratoire central de l'institut d'électronique de microélectronique et de nanotechnologie dans l'équipe composants et dispositifs microondes de puissance dirigée par le Pr J-C De Jaeger et encadré par Dr. A. SOLTANI.

Sujet proposé : Etude des Phonons Polaritons de Surface par spectroscopie infrarouge de films minces de nitrure d'aluminium.

Cette étude a un double intérêt : elle entre dans le cadre de l'évaluation de la qualité des couches de nitrure d'aluminium en vu de les utiliser pour réaliser des composants électroniques (couche de passivation, couche active, isolant de grille, MEMS…) ou optoélectroniques (photodétecteur...). Et elle devrait à terme permettre d'évaluer avec plus d'exactitudes le caractère piézoélectrique des couches de nitrure d'aluminium. Pour y parvenir, mon tuteur de stage a opté pour une analyse purement optique et sans contact.

Missions proposées au candidat :

Le stage comporte deux parties :

- La première partie du travail est purement expérimentale et consiste à mesurer les spectres de réflectivité de différents films minces de nitrure d'aluminium par spectroscopie infrarouge ou moyen de deux techniques (PIRR et ATR).
- La seconde partie est plutôt théorique et consiste à décorréler les différents modes propres du nitrure d'aluminium en films minces et de mettre en évidence les phonons polaritons de surface quand ils existent.

Les échantillons de films minces de AlN sont obtenus par pulvérisation magnétron ou par épitaxie (MOCVD, MBE).

1ère période du stage : découverte du laboratoire (salle blanche, centrale de caractérisation, salle informatique), les thèmes de recherche de l'équipe « puissance ».

2ième période du stage : Présentation détaillée du sujet du stage (tenants et aboutissants). Suivie d'une étude bibliographique (bibliothèque, internet, rapports de l'équipe) et de la mise à disposition des échantillons à étudier.

3ième période du stage : Apprentissage de l'outil de caractérisation par spectroscopie infrarouge en transmission, en réflexion sous incidence (quasi)-normal, oblique et rasant (PIRR). Ainsi que des mesures en réflexion totale atténuée sous différents angles d'incidence (ATR).

4ième période du stage : Mesures expérimentales sous différentes conditions (angles d'incidence, polarisations optique) d'une dizaine de films minces de wAlN (FTIR, PIRR, ATR).

5ième période : Etude théorique de la réflectivité en infrarouge de films minces sous différents angles d'incidence, différents polarisations optique de films minces de wAlN avec un axe c perpendiculaire à la surface de l'échantillon. Programmation des calculs sous Matlab. Confrontation avec les points expérimentaux.

6ième période : Calculs théoriques des courbes de dispersion des phonons dans un systèmes à multicouches contenant un substrat et un film de wAlN avec un axe c perpendiculaire à la surface de l'échantillon. Programmation des calculs sous Matlab. Confrontation avec les points expérimentaux.

7ième et dernière période : Analyse et discussion des résultats.

Sommaire

Remerciements 2
Liste des figures 6
Liste des tableaux 8
Liste des abréviations 9
Contexte générale 10
Introduction 12
Chapitre I : Le Nitrure d'Aluminium 13
I- Généralités sur le matériau Nitrure d'Aluminium 14
II- Description des substrats 17
II-1- Saphir (Al_2O_3) 17
II-2- Silicium (Si) 17
II-3- Support composite 17
Chapitre II : Caractérisation optique 19
I- Spectroscopie Infrarouge 20
II- Modes optiques de la structure cristalline w-AlN 20
II-1- Notions sur les quasi-modes (Q) 22
III- Réflectométrie en incidence quasi-normale et rasante 22
IV- Définition du phonon-polariton de surface PPS 29
V- Réflexion totale atténuée et courbes de dispersion des phonons 30
Conclusion générale 38
Références 39
ANNEXE A 41
ANNEXE B 43
ANNEXE C (échantillons retenus) 47

LISTE DES FIGURES

Figure 1.1: (A) Maille élémentaire hexagonale et cubique de AlN ; *(B)* Mise en évidence de la différence d'orientation des tétraèdres pour les deux phases cristallines [1]..... 14

Figure 1.2: Création d'un dipôle élémentaire induite par une contrainte mécanique suivant la direction (0001) de la phase hexagonale d'AlN. 16

Figure 2.1: Schéma de la géométrie en réflexion IR d'une lumière polarisée. 20

Figure 2.2 : (b) condition pour observer l'effet Berreman 21

Figure 2.3: Les modes de vibrations sont définis au centre de la première zone de Brillouin (en Γ). 21

Figure 2.4: Les spectres de réflectivité IR, en polarisation *p* (a) et *s* (b) du saphir (Al_2O_3) en incidence quasi-normale ($\boldsymbol{\theta = 10°}$). Les modes optiques de saphir sont présentés en ligne vertical. 23

Figure 2.5: Spectres de réflectivité IR, en polarisation *p* (a) et *s* (b) du saphir (Al_2O_3) en incidence oblique ($\boldsymbol{\theta = 45°}$). Les modes optiques du saphir sont présentés en ligne vertical. 24

Figure 2.6: Les spectres de réflectivité IR, en polarisation *p* (a) et *s* (b) de AlN wurtzite sur substrat de saphir (Al_2O_3) en incidence quasi-normale ($\boldsymbol{\theta = 10°}$). Les modes optiques de AlN et de saphir sont présentés en ligne verticale. 24

Figure 2.7: Spectres théorique et expérimental de réflectivité IR, en polarisation *p* (a) et *s* (b) de AlN wurtzite sur substrat de saphir (Al_2O_3) en incidence oblique ($\boldsymbol{\theta = 45°}$). Les modes optiques de AlN et de saphir sont présentés en ligne vertical. 25

Figure 2.8: Spectres de réflectivité IR, en polarisation *p* (a) et *s* (b) de AlN wurtzite sur substrat de silicium (Si) en incidence quasi-normale ($\boldsymbol{\theta = 10°}$). 26

Figure 2.9: Spectres de réflectivité IR, en polarisation *p* (a) et *s* (b) de AlN wurtzite sur substrat de silicium (Si) en incidence oblique ($\boldsymbol{\theta = 45°}$). 26

Figure 2.10: Spectres de réflectivité IR, en polarisation *p* (a) et s (b) ; les spectres expérimentaux (en gras) et théorique (couleurs bleue ou rouge) sous incidence rasante ($\boldsymbol{\theta = 85°}$). 28

Figure 2.11: Zoome sur les spectres de réflectivité IR en polarisation *p* (a) et s (b) : spectres expérimentaux (motifs ronds) et théoriques (lignes pleines) de AlN sur substrat Pt/Al_2O_3 sous incidence rasante ($\boldsymbol{\theta = 85°}$). 28

Figure 2.12: Spectres de réflectivité IR en polarisation *p* (a) et *s* (b) ; spectres expérimentaux (en gras) et théorique (couleurs bleue ou rouge) de AlN wurtzite sur TiN/Si en incidence rasante de ($\boldsymbol{\theta = 85°}$). 29

Figure 2.13: Zoom sur les spectres de réflexion IR en polarisation *p* (a) et *s* (b) : spectres expérimentaux (motifs ronds) et théoriques (lignes pleines) de AlN sur substrat TiN/Si sous incidence rasante ($\boldsymbol{\theta = 85°}$). 29

Figure 2.14: Schéma de principe d'un ATR. 30

Un angle d'incidence $\boldsymbol{\theta = 45°}$ est utilisé pour faire les mesures expérimentales. L'indice du prisme de Germanium est $\boldsymbol{np = 4}$; ($\boldsymbol{nair = 1}$), l'angle critique $\boldsymbol{\theta c = \arcsin nairnp = 14.48°}$, l'indice optique du film est $\boldsymbol{nf}$ [24]. 30

Figure 2.15: Schéma de la structure multicouche Air/AlN/Al_2O_3 ou Air/AlN/Si. 31

Figure 2.16: Parties réelles de la fonction diélectrique $\boldsymbol{\varepsilon r}$ en polarisation p et s de AlN et du saphir. 32

Figure 2.17: Partie réelle de la fonction diélectrique $\boldsymbol{\varepsilon r}$ en polarisation p et s de AlN sur substrat saphir; les modes propres optiques de AlN sont présentés par des lignes verticales. 33

Figure 2.18: Calcul théorique des courbes de dispersion des polaritons de surface (a) et des polaritons d'ondes guidées (b) de AlN sur substrat saphir. Les vecteurs d'ondes du vide et du prisme de germanium ($\boldsymbol{np = 4}$) sont respectivement indiqués par $\boldsymbol{kvac}$ et $\boldsymbol{kp}$. 34

Figure 2.19: Spectre expérimental en ATR d'un film mince de AlN/Saphir. 34

Figure 2.20: La géométrie et les coordonnés du système utilisé, les indices ($\boldsymbol{f}$: $\boldsymbol{film}$; $\boldsymbol{s}$: $\boldsymbol{substrat}$; $\boldsymbol{d}$: $\boldsymbol{l'épaisseur\ du\ film}$) [29]. 35

Figure 2.21: Calcul théorique de la courbe de dispersion des phonons polaritons de surface de AlN sur substrat silicium (Si). $\boldsymbol{ksi}$ correspond au vecteur d'onde du substrat silicium, les vecteurs d'ondes dans le vide et dans le prisme de germanium ($\boldsymbol{np = 4}$) sont indiqués respectivement par $\boldsymbol{kvac}$ et $\boldsymbol{kp}$, en angle d'incidence ($\boldsymbol{\theta = 45°}$) 36

Figure 2.22: Spectre expérimental en ATR de AlN sur substrat Silicium en incidence oblique ($\boldsymbol{\theta = 45°}$) et avec un prisme de germanium ($\boldsymbol{np = 4}$). 36

Figure 2.23: Calcul théorique de la courbe de dispersion des phonons polaritons de surface de AlN sur substrat platine (Pt), les vecteurs d'ondes dans le vide et dans le prisme de germanium sont indiqués respectivement par $\boldsymbol{kvac}$ et $\boldsymbol{kp}$, en angle d'incidence ($\boldsymbol{\theta = 45°}$). 37

Figure 2.24: Spectre expérimental en ATR de AlN sur substrat Platine/Al_2O_3. 37

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 1.1: Récapitulatif des principales propriétés du nitrure d'aluminium. 15

Tableau 2.2: Les paramètres utilisés pour le calcule théorique de la réflexion en IR de AlN sur les substrats suivant : Al_2O_3, Si, Pt, TiN. 23

Tableau 2.3: Les valeurs de la fréquence plasma et d'amortissement du Platine (Pt) [20] et du Nitrure de Titane (TiN) [21]. 27

Tableau 2.4: Les conditions d'existence des polaritons de surface (SP). 32

Tableau 2.5: Les conditions d'existences du polariton de surface (SP). 35

Tableau 4.1: L'induction électrique pour chaque couche de l'échantillon Air/AlN/Al2O3. 43

Tableau 4.2: Les solutions des équations (*1.1*), (*1.2*) et (*1.3*) de chaque couche de la structure. 43

LISTE DES ABRÉVIATIONS

- AlN : ***A***luminum ***N***itride (Nitrure d'aliminium)
- ATR : ***A***ttenuated ***T***otal ***R***eflection (Réflexion totale atténuée)
- FIR : ***F***ar ***I***nfrared (Infrarouge lointain)
- GWP: ***G***uided ***W***ave ***P***olariton (Polariton à onde guidée)
- HVPE : ***H***ydride ***V***apour ***P***hase ***E***pitaxy
- IR : ***I***nfrarouge (Infrarouge)
- MOCVD : Metalorganic Vapour Phase Epitaxy (Dépôt en phase vapeur d'organométalliques)
- Pt : ***P***latinum (Platine)
- SP : ***S***urface ***P***olariton (Polariton de surface)
- SPP : ***S***urface ***P***honon ***P***olariton (Phonon-polariton de surface)
- TM : ***T***ransverse ***M***agnetic (Transverse magnétique)
- TE : ***T***ransverse ***E***lectric (Transverse électrique)
- TiN : ***T***itanium ***N***itride (Nitrure de titane)

CONTEXTE GÉNÉRALE

Le nitrure d'aluminium (AlN) est un matériau qui présente des propriétés remarquables et c'est pourquoi il est très utilisé en microélectronique et en optoélectronique. Une de ses propriétés fondamentales auxquelles nous nous sommes intéressés est sa piézoélectricité. Il peut être synthétisé sous forme de films minces à base température (par pulvérisation ou par dépôt chimique en phase vapeur) ou à haute température par épitaxie (MOCVD, MBE, HVPE…). La première méthode est couramment utilisée pour des raisons évidentes de coût et de compatibilité avec les procèdes technologiques standards. Cependant, dans ce cas, la qualité cristallographique obtenu est y dégrader (forme polycristalline et hautement orienté au mieux) est le caractère piézoélectrique y moindre voire inexistant. Ce qui a pour conséquence un disfonctionnement voir un non fonctionnement du composant à réaliser.

Il existe plusieurs méthodes parfaitement reconnus pour qualifier la qualité cristalline d'un film mince, (diffraction des rayons X (rocking curve, phi-scan), spectroscopies Infrarouge et µRaman, microscopie électronique à haute résolution, AFM….). Cependant, il n'existe pas à l'heure actuelle de techniques connues qui permettent de quantifier le caractère piézoélectrique d'un film wAlN. Il existe néanmoins la techniques PFM (piezoelectric force microscopy) qui permet de donner le coefficient piézoélectrique d_{33} avec plus au moins de précision, mais cette technique est longue et exclusivement locale (à l'échelle nanométrique). La validité de la mesure est conditionnée aux états de la surface (oxydation locale, pièges de surface…) et cette technique ne permet pas de remonter au comportement macroscopique d'une couche mince piézoélectrique.

L'objectif de ce travail est donc de proposer une nouvelle méthode qui permette de connaitre le caractère piézoélectrique d'un film mince de AlN sans pour autant passer par la phase fabrication et test du composant. Pour tenter d'y parvenir, nous étudions la qualité matériaux de films minces de wAlN, en utilisant des couches qui sont réalisés soit par pulvérisation magnétron soit par épitaxie sur différant supports (substrats de silicium ou de saphir et substrats métalliques composite).

Après avoir testé l'ensemble des techniques cités précédemment, M.SOLTANI à opté pour la spectroscopie infrarouge par réflexion. C'est une méthode très efficace pour analyser la nature des liaisons atomiques à courte et longue portée. Cependant, en fonction de l'orientation cristalline de l'axe c une étude théorique est nécessaire pour découpler les modes propres des quasi-modes de wAlN. Enfin, pour analyser les charges de surface dues à l'effet piézoélectrique, nous avons opté pour la réflexion totale atténuée dans le domaine infrarouge. En effet l'hypothèse posée ici consiste à suggérer que la présence de phonons-

polaritons de surface est directement liée au caractère piézoélectrique de wAlN. Pour quantifier les modes des quasi particules de PPS, une étude théorique des courbes de dispersion des phonons y est nécessaire. Une discussion clôturera cette étude.

INTRODUCTION

Les films minces de nitrure d'aluminium (AlN) sont largement utilisés en microélectronique. Dans le groupe Composants et Dispositifs Microondes de Puissance, ces films ultra-minces constituent la zone active des transistors de puissance en hyperfréquence à haute mobilité et sont utilisés comme couche active piézoélectrique pour des dispositifs à ondes élastique de surface afin de réaliser différent types de capteurs physico-chimique. Cependant, ces matériaux présentent de nombreuses inconnues en fonction de leur mode d'élaboration. La taille de l'objet modifie la contribution piézoélectrique de la couche et des phénomènes de couplage interviennent pour des structures à l'échelle nanométrique comme les transistors à nano-rubans à base de GaN ou plus simplement sur des nano-plots de matériaux. Dans le cas des composants passifs, d'autres phénomènes comme la taille et les joints de grains, les domaines d'inversion ou les dislocations réduisent considérablement les performances électriques des dispositifs réalisés.

L'étude proposée dans ce stage a pour objectif d'étudier la qualité cristalline de films minces de nitrure d'aluminium wurtzite par une technique rapide et non destructive qu'est la spectroscopie infrarouge. Elle a pour objet de donner des éléments de réponse sur le caractère piézoélectrique d'un film mince de nitrure d'aluminium notamment lorsque des phonons-polaritons de surface apparaissent.

Ce rapport est le bilan de cinq mois de travail et se répartit en quatre chapitres:

- ***Le premier chapitre*** donne une description détaillée des propriétés cristallographiques du cristal de nitrure d'aluminium et l'origine de son comportement piézoélectrique.
- ***Le second chapitre*** traite de la caractérisation des films minces d'AlN étudiés au cours de ce stage. Les mesures courant-tension permettent d'accéder à la résistivité électrique des couches. La spectroscopie infrarouge permet de remonter aux modes de vibrations du matériau et par conséquent à la composition moléculaire de la cellule élémentaire de AlN. Cette dernière comportera 2 techniques distinctes : la réflectance sous incidence oblique et la réflectivité totale atténuée.
- ***Le troisième chapitre*** est dédié à la caractérisation matériau AlN.
- ***Le dernier chapitre*** est dédié à la synthèse des résultats et aux discussions.

Enfin, nous terminerons par une conclusion générale dans laquelle les principaux résultats de ce projet seront résumés et les perspectives qu'offre cette étude.

Chapitre I : Le Nitrure d'Aluminium

Propriétés cristallographiques

Origine de l'effet piézoélectrique

I- Généralités sur le matériau Nitrure d'Aluminium

➢ Structures cristallographiques

Le nitrure d'aluminium (AlN) est un composé semiconducteur III-V très stable sous sa forme stœchiométrique même à haute température. Cette stabilité découle de sa forte énergie de liaison (11,5 eV). L'AlN se présente sous deux structures cristallographiques:

- Une structure hexagonale thermodynamiquement stable de type wurtzite (***Figure 1.1(A)***), de paramètres de maille a = 3,1114 Å et c = 4,9792 Å (fiche JCPDS 25-1133);
- Une structure cubique métastable de type zinc blende (***Figure 1.1(A)***), de paramètre de maille a = 4,0450 Å (fiche JCPDS 46-1200).

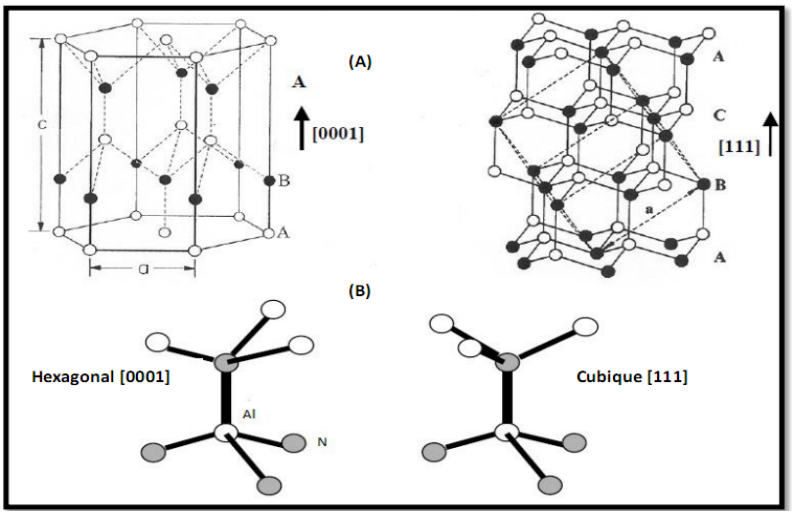


Figure 1.1: (A) Maille élémentaire hexagonale et cubique de AlN ; ***(B)*** Mise en évidence de la différence d'orientation des tétraèdres pour les deux phases cristallines [1].

Ces deux structures présentent un caractère piézoélectrique dans des directions cristallographiques différentes : (111) dans la phase cubique et (0001) dans la phase hexagonale (***Figure 1.1(B)***).

La structure cubique est métastable, cependant elle attire de plus en plus l'attention du fait de ses propriétés supérieures à la structure hexagonale. En effet, elle possède une conductivité thermique (250-600 W/m.K) et une résistivité électrique plus élevée (>10^{16} Ω.cm) [2], ce qui est aussi le cas pour sa vitesse de propagation acoustique du fait de son degré de symétrie supérieur [3]. Cette phase reste malgré tout difficile à synthétiser, elle apparaît surtout comme une phase parasite lors de la synthèse des couches de AlN hexagonales quand celles-ci présentent des défauts structuraux. Au cours de ce travail, nous nous sommes uniquement intéressés à la phase hexagonale pour sa piézoélectricité suivant l'axe cristallographie c.

➢ **Propriétés générales**

Le nitrure d'aluminium est un semi-conducteur présente une large bande interdite (LBI) d'environ 6,2 eV [4], soit la plus élevée des composés nitrures d'éléments III. Il est utilisé avec le nitrure de gallium wurtzite pour la fabrication de détecteurs UV à base de l'alliage $Al_xGa_{1-x}N$ [5] ou comme couche barrière pour la formation d'un gaz d'électrons bidimensionnelle des transistors de puissance en hyperfréquence.

Energie bande interdite (eV)	6,2
Conductivité thermique (W/m.K)	285
Résistivité électrique (Ω.cm)	10^{13}
Dureté (GPa) [6]	11,8
Module de Young (GPa)	300
Constante diélectrique	8,5-10
Température de fusion (K) [7]	3273
Coefficient de dilatation thermique (10^{-6}/K) [6]	Axe-c : 5,3 Axe-a : 4,2
Constante diélectrique en basse fréquence (BF) [8]	8,5-9.2

Tableau 1.1: Récapitulatif des principales propriétés du nitrure d'aluminium.

De par sa LBI, le matériau AlN est un isolant électrique avec une résistivité de l'ordre de 10^{14} Ω.cm, mais c'est aussi un conducteur thermique avec 285 W/m.K [9] similaire aux métaux. Ces propriétés associées à celles du tableau 1.1 expliquent son fort intérêt pour les applications en électronique de puissance et même en haute fréquence.

Le nitrure d'aluminium présente également de bonnes propriétés mécaniques (comme par exemple son module de Young (300 GPa) et sa dureté (12 GPa), lesquels sont mis à profit comme couche protectrice) et optiques avec un indice de réfraction élevé (entre 1,8 et 2,2 à 632,8 nm selon sa nature et la qualité cristalline) ainsi qu'une très grande transparence dans le visible et dans le proche infrarouge (pour le domaine 400 nm - 3 µm). Il est donc couramment utilisé en tant que matériau protecteur pour l'optique ou comme fenêtre infrarouge [10].

➢ **Origine du comportement piézoélectrique**

Le comportement piézoélectrique d'un matériau dépend directement de la structure de celui-ci. Lorsqu'une contrainte mécanique conduit à la non superposition au niveau de chaque maille des barycentres « négatif» et « positif », la maille se polarise. La phase hexagonale présente la propriété de piézoélectricité suivant l'axe (0001). ***La Figure 1.2*** montre l'apparition d'une polarisation électrique à l'intérieur des tétraèdres formant la

maille sous l'effet d'une contrainte mécanique externe. Ce phénomène est réversible dans le sens ou si une différence de potentielle est appliquée, une contrainte interne apparaît.

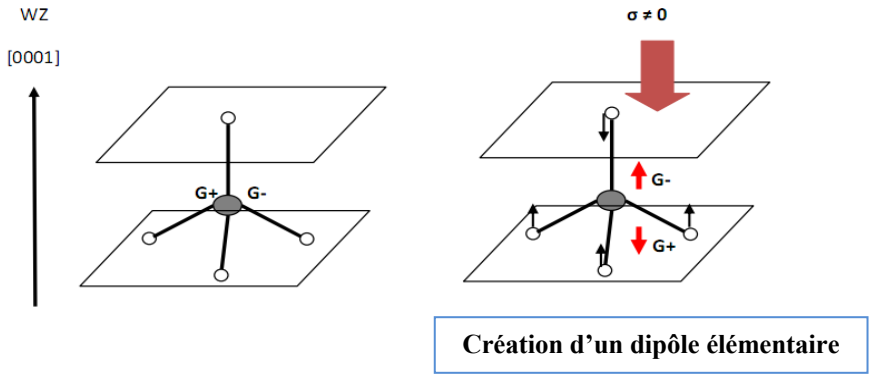


Figure 1.2: Création d'un dipôle élémentaire induite par une contrainte mécanique suivant la direction (0001) de la phase hexagonale d'AlN.

Cependant, il est à noter qu'au sein de la phase hexagonale, une polarisation spontanée existe [11]. Une polarisation non nulle est observée en l'absence de contrainte dans la couche. Ce phénomène s'explique de la même façon que la polarisation piézoélectrique: il y a non coïncidence des barycentres de charges négatives et positives. Cette non superposition a pour origine un désordre dans l'alignement des tétraèdres. En effet, les atomes d'azote présentent une forte électronégativité et attirent les électrons de la bande de valence tandis que les atomes d'aluminium sont beaucoup moins électronégatifs. La distance entre les atomes d'azote va être différente suivant que l'on se place dans le sens de croissance de la couche ou dans les autres directions, ceci va créer l'apparition de dipôles élémentaires dans les tétraèdres. La polarisation spontanée suivant l'axe de croissance AlN (0001) est donc la résultante des dipôles élémentaires que possède chaque tétraèdre. Dans le cas du nitrure d'aluminium, cette polarisation spontanée est de l'ordre de -0,081 C/m² [12] et -0,100 C/m² [13].

La polarisation totale dans une couche de nitrure d'aluminium sera par conséquent la résultante de ces deux polarisations : spontanée et piézoélectrique.

Le nitrure d'aluminium cristallise suivant le groupe ponctuel cristallographique 6mm (phase hexagonale). Il possède donc un axe de rotation direct d'ordre 6 (une rotation d'angle $\frac{2\pi}{6}$ autour de l'axe c) et la notation « mm » indique qu'il y a deux familles de miroir qui complètent la symétrie du cristal. L'appartenance à ce groupe ponctuel permet de réduire le nombre de composantes du tenseur du coefficient de piézoélectricité à 5 non nulles, dont 3 sont indépendantes. Le tenseur devient :

$$d_{ij}=\begin{bmatrix} 0 & 0 & d_{31} \\ 0 & 0 & d_{32} \\ 0 & 0 & d_{33} \\ 0 & d_{24} & 0 \\ d_{15} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Deux composantes de ce coefficient sont particulièrement retenues : d_{31} et d_{33}. Ils sont mesurés par différentes méthodes et souvent utilisés comme facteur de qualité de la piézoélectricité d'un matériau.

II- Description des substrats

II-1- Saphir (Al_2O_3)

Des substrats de saphir (Al_2O_3) de surface [0001] (dans le système d'axes du cristal hexagonal) ont été utilisés pour la croissance épitaxiale de films minces de AlN. L'accord en paramètre de mailles entre AlN (0001) et Al_2O_3 (0001) est peu favorable (13,7 % à température ambiante). Ces films crus par épitaxie sont synthétisés par HVPE, MOCVD ou MBE pour la majorité d'entre eux. L'écart de paramètres de maille ou « mismatch » entre AlN et Al_2O_3 sera examiné après la description de la structure atomique de Al_2O_3.

II-2- Silicium (Si)

Nous avons aussi étudié des couches minces d'AlN réalisées sur substrat de Si (100) par pulvérisation magnétron pour des raisons évidentes de coût. Nous nous sommes donc également intéressés aux propriétés optique et piézoélectrique de ces couches.

II-3- Support composite

- **Substrat de Platine sur saphir (Pt/ Al_2O_3)**

Le platine est largement accepté comme le standard en matière d'électrode inférieure pour les PZT. En effet, son inertie chimique est grande et il est très difficile à oxyder. De plus, la différence des paramètres de maille entre le platine et les PZT est inférieure à 3% [14, 15] ce qui laisse entrevoir la possibilité d'orienter cristallographiquement la couche de PZT suivant celle du platine [16]. Cependant, l'adhérence du platine sur la silice ou les nitrures est mauvaise. Dans notre cas, la couche de platine de 1µm est épitaxiée à haute température sur un substrat de saphir et il est orienté (111) pour facilité la reprise de croissance de AlN orienté (0002).

- **Substrat de Nitrure de Titane sur Silicium (TiN/Si)**

Le nitrure de titane est déposé par pulvérisation magnétron et se cristallise sous forme cubique sur substrat de silicium (001) suivant la direction (111). Tout comme la platine, c'est l'orientation préférentielle pour l'obtention de AlN orienté (0002). Les principales caractéristiques cristallographiques de TiN sont présentées dans ***le tableau 1.2*** ainsi que certaines de ses propriétés**.** La couche de nitrure de titane est de 250nm.

	TiN
Structure cristallographique	Cubique à faces centrées
Paramètre de maille	a_c = 4,2417 Å
Coordination	Octaédrique
Température de fusion (°C)	2950
Température d'oxydation (°C)	550
Conductivité thermique (W/(m.°C))	19,2
Coefficient de dilatation thermique (mm/K)	$9{,}4.10^{-6}$

Tableau 1.2: Propriétés structurales et physiques de TiN.

Chapitre II : Caractérisation optique

Modes optiques de la structure cristalline w-AlN

Phonon-Polariton de Surface

Réflectivité - Spectroscopie infrarouge

I- Spectroscopie Infrarouge

La spectroscopie Infrarouge à Transformée de Fourier (FTIR) est une méthode non-destructive, qui fournit une information rapide sur la composition et la structure cristalline d'un film ou d'un matériau. Les mesures peuvent être faites en lumière naturelle ou polarisés à l'aide d'un polariseur couvrant tout le moyen infrarouge (soit de 4000 cm^{-1} (2.5 μm) à 400 cm^{-1} (25 μm)) et permettant de départager les composantes parallèle (P) ou perpendiculaire (S) (***la figure 2.1***) des modes observés permettant une interprétation plus aisée. Ces spectres peuvent présenter des absorptions dues à la présence de polaritons de surface si les conditions de leurs existences sont réalisées au cours de la mesure (***cf. partie V de ce chapitre***).

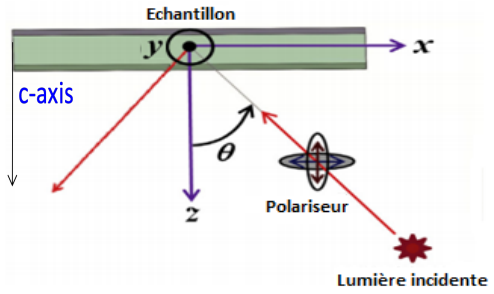


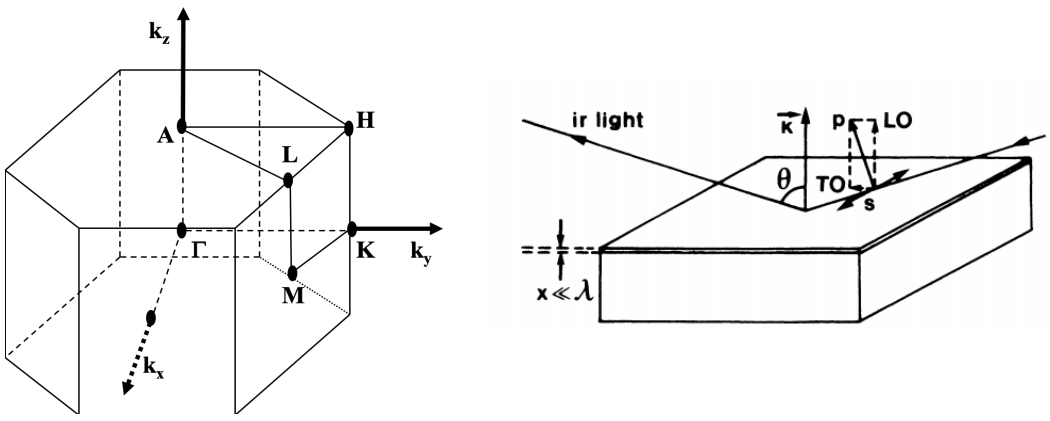
Figure 2.1: Schéma de la géométrie en réflexion IR d'une lumière polarisée.

II- Modes optiques de la structure cristalline w-AlN

Selon la théorie des groupes qui permet de remonter aux différents modes de vibrations des matériaux cristallins, la représentation irréductible du cristal de AlN wurtzite est donnée par: $\Gamma_{3N}=A_1 \oplus 2B_1 \oplus E_1 \oplus 2E_2$ (***Eq.2.1***)

A_1 et E_1 sont des modes polaires donc actifs en infrarouge alors que B_1 et E_2 sont non polaires.

Les orientations des vecteurs d'ondes des phonons dans le cristal d'AlN équivalente dans le réseau réciproque sont données comme suit :



(a) (b)

Figure 2.2 : (b) condition pour observer l'effet Berreman

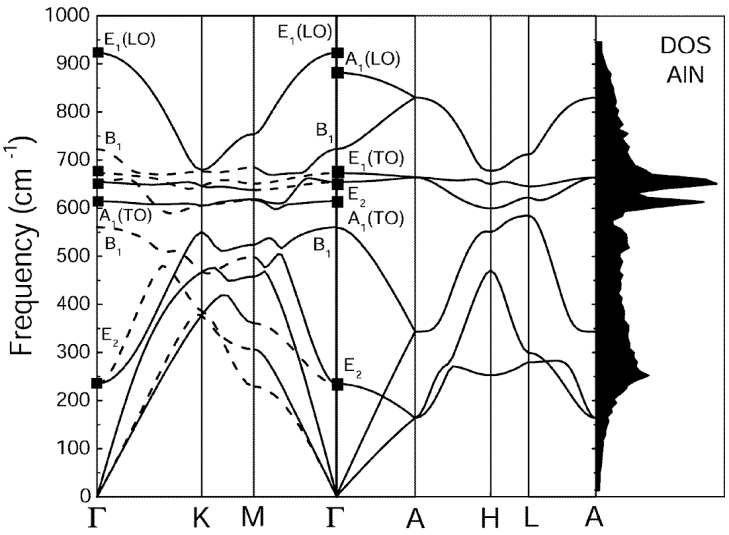


Figure 2.3: Les modes de vibrations sont définis au centre de la première zone de Brillouin (en Γ).

Les modes de vibrations sont définis au centre de la première zone de Brillouin (en Γ) dans cette figure qui donne les courbes de dispersion des phonons dans le réseau réciproque. La densité d'états est donnée à droite à titre indicatif.

- L'effet Berreman consiste à rendre actif le mode LO lorsqu'on attaque le film mince sous incidence oblique avec la condition que l'épaisseur de couche soit négligeable devant la longueur d'onde de l'onde incidence (***cf. la figure 2.2(b)***).

La relation de Lyddane-Sachs-Teller qui relie la fréquence des modes LO, TO aux permittivités statique et à haute fréquence, est donnée par:

$$\varepsilon_0 = \varepsilon_\infty \left(\frac{\omega_{LO}}{\omega_{TO}}\right)^2 \qquad (\textbf{\textit{Eq.2.2}})$$

II-1- Notions sur les quasi-modes (Q)

La fréquence des quasi-modes de phonons optique actifs en infrarouge est correspond au couplage entre la composante longitudinal LO et transversale TO par le champ électrique macroscopique associe au phonon longitudinal. Le champ E sert à renforcé la constante de rappel de phonon et par conséquent l'apparition des fréquences LO sur celle de TO.

La valeur de la fréquence de ces quasi-modes en fonction de l'orientation de l'axe c vis-à-vis du faisceau incident est donné par les relations suivantes :

Force électrostatique de longues portées	Force interatomique de courte portées (Anisotropie de constant de force)
Dédoublement LO-LO Dédoublement TO-TO	Dédoublement LO-TO
$\omega^2_{Q(TO)} = \omega^2_{E1(TO)}\cos^2(\theta) + \omega^2_{A1(TO)}\sin^2(\theta)$ $\omega^2_{Q(LO)} = \omega^2_{A1(LO)}\cos^2(\theta) + \omega^2_{E1(LO)}\sin^2(\theta)$	$\omega^2_{Q(E1)} = \omega^2_{E1(TO)}\cos^2(\theta) + \omega^2_{E1(LO)}\sin^2(\theta)$ $\omega^2_{Q(A1)} = \omega^2_{A1(TO)}\cos^2(\theta) + \omega^2_{A1(LO)}\sin^2(\theta)$

Tableau 2.1: Dans les cristaux uniaxes de type wurtzite [14].

Ces relations vont nous permettre d'attribuer avec exactitude les pics d'absorption sur le spectre de réflectivité aux modes propres et/ou aux quasi-modes lorsque l'axe c de wAlN fait un angle Θ avec le vecteur d'onde du faisceau incident.

III- Réflectométrie en incidence quasi-normale et rasante

Les courbes théoriques en réflexion infrarouge (IR) d'une structure à multicouches (air/AlN/Al_2O_3, air/AlN/Si, air/AlN/Pt, air/AlN/TiN) ont été simulé en se basant sur les équations de Snell-Descartes appliquées aux films minces ***(annexe A)***. Pour la structure wurtzite de AlN, l'axe optique « c » est parallèle à la direction de croissance ($c_{axis}||z$) et perpendiculaire à la direction x ($c_{axis}\perp x$).

La fonction diélectrique est donnée par [15] :

$$\varepsilon_{l,||(\perp)}(\omega) = \left[\varepsilon_{\infty,||(\perp)}\left(\frac{\omega^2_{LO,||(\perp)} - \omega^2 - i\omega\gamma_{LO,||(\perp)}}{\omega^2_{TO,||(\perp)} - \omega^2 - i\omega\gamma_{TO,||(\perp)}}\right)\right]_l \qquad (\textbf{\textit{Eq.2.3}})$$

où ε_∞ est la constant diélectrique en haute fréquence ; ω est la fréquence angulaire, ω_{LO} et ω_{TO} sont respectivement, les fréquences longitudinal-optique (LO) et transverse-optique (TO) des phonons. γ_{LO} et γ_{TO} sont respectivement les constantes d'amortissement des modes LO et TO. Les symboles $||,\perp$ représentent les modes de vibrations parallèle, perpendiculaire suivant l'axe optique c (c_{axis}). L'indice l désigne le numéro de la couche

dans l'empilement constituant la structure à étudier. Par exemple : air ($l = 1$), AlN ($l = 2$), substrat ($l = 3$).

	$\varepsilon_{\infty,\parallel}$	$\omega_{TO,\parallel}$ [a]	$\omega_{LO,\parallel}$ [a]	$\gamma_{TO,\parallel}$ [a]	$\gamma_{LO,\parallel}$ [a]	$\varepsilon_{\infty,\perp}$	$\omega_{TO,\perp}$ [a]	$\omega_{LO,\perp}$ [a]	$\gamma_{TO,\perp}$ [a]	$\gamma_{LO,\perp}$ [a]
AlN	4.37[b]	608[b]	889[b]	4.5[b]	7.3[b]	4.17[b]	667[b]	910[b]	2.9[b]	7.5[b]
Al_2O_3	3.07[c]	398[c]	511[c]	5.3[c]	1.1[c]	3.08[c]	385[c]	388[c]	3.3[c]	3.1[c]
	-	582[c]	881[c]	3[c]	15.4[c]	-	439[c]	482[c]	3.1[c]	1.9[c]
	-	-	-	-	-	-	569[c]	629[c]	4.7[c]	5.9[c]
	-	-	-	-	-	-	634[c]	907[c]	5[c]	14.7[c]
Si	11.9	-	-	-	-	11.9	-	-	-	-

[a] Unité en cm^{-1}.
[b] [16].
[c] [17].

Tableau 2.2: Les paramètres utilisés pour le calcule théorique de la réflexion en IR de AlN sur les substrats suivant : Al_2O_3, Si, Pt, TiN.

➢ **Réflectométrie du substrat saphir seul (Al_2O_3)**

Les figures 2.4 et 2.5 représentent les résultats théoriques et expérimentales de la réflectivité en lumière polarisée (polarisation p et s) du saphir mesurée sous incidences quasi-normale ($\theta = 10°$) et oblique ($\theta = 45°$). Ces mesures sont faites pour mettre en évidence les modes optiques du saphir, qui nous permettront de les distinguer de ceux que l'on obtient avec un bicouche AlN sur saphir.

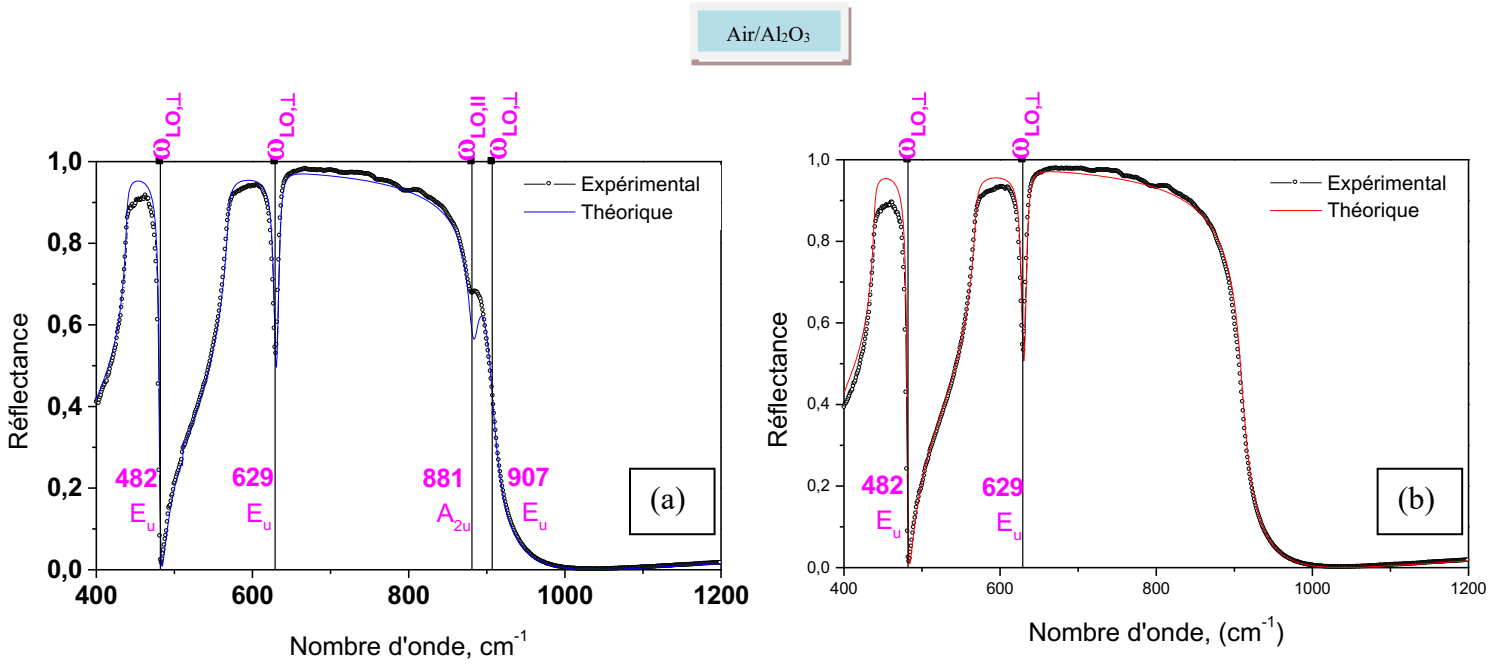


Figure 2.4: Les spectres de réflectivité IR, en polarisation *p* (a) et *s* (b) du saphir (Al_2O_3) en incidence quasi-normale ($\theta = 10°$). Les modes optiques de saphir sont présentés en ligne vertical.

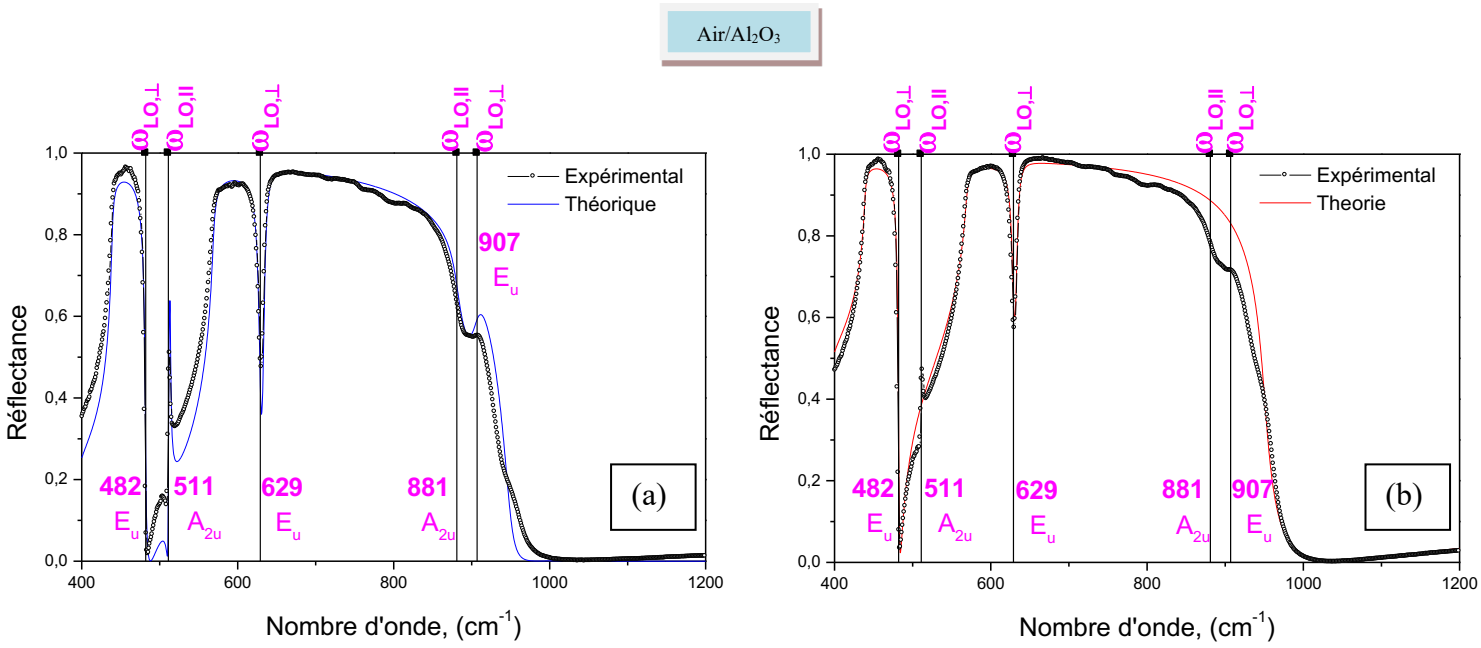


Figure 2.5: Spectres de réflectivité IR, en polarisation *p* (a) et *s* (b) du saphir (Al_2O_3) en incidence oblique ($\theta = 45°$). Les modes optiques du saphir sont présentés en ligne vertical.

➢ **Réflectométrie de AlN sur substrat de saphir** (*échantillon JAP*)

Les figures 2.6 et 2.7 représentent la réflectivité théorique et expérimentale de AlN sur substrat de saphir mesurées sous incidences quasi-normale ($\theta = 10°$) et rasante ($\theta = 45°$). Les figures montrent les spectres de réflectivité de 400 cm^{-1} à 1000 cm^{-1} dans la région *reststrahlen* (haute réflectivité R≈1, T=A≈0) de AlN (600-920 cm^{-1}) et de saphir (Al_2O_3) (400-910 cm^{-1}).

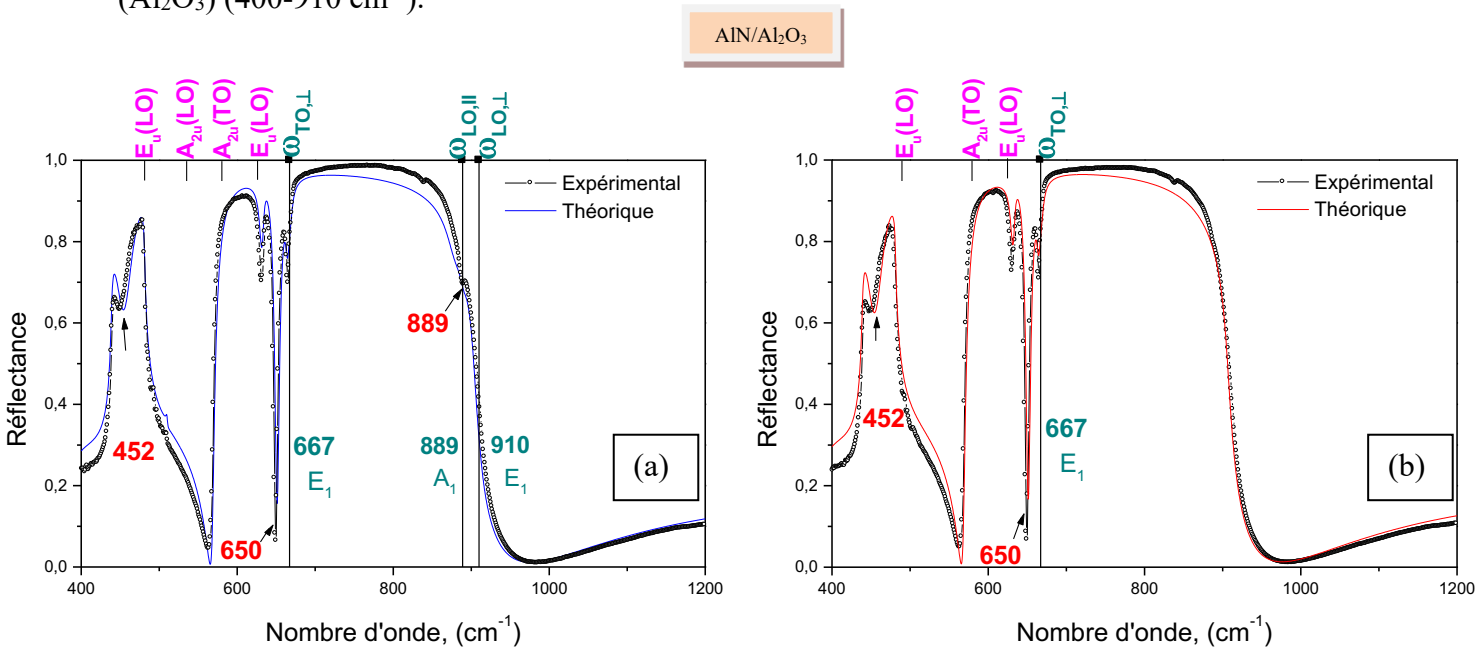


Figure 2.6: Les spectres de réflectivité IR, en polarisation *p* (a) et *s* (b) de AlN wurtzite sur substrat de saphir (Al_2O_3) en incidence quasi-normale ($\theta = 10°$). Les modes optiques de AlN et de saphir sont présentés en ligne verticale.

En polarisation p (***la figure 2.6(a) et 2.7(a)***), une absorption apparait à 889 cm^{-1} laquelle est attribuée à l'effet Berreman c'est-à-dire l'excitation d'un mode LO de forte anisotropie de AlN [18]. Cet effet nécessite néanmoins à ce que l'épaisseur du film mince soit beaucoup plus faible que la longueur d'onde de l'onde incidente (***figure 2.2***). La fréquence de ce mode peut varier entre $\omega_{LO,||}$ et $\omega_{LO,\perp}$ selon l'orientation du champ électrique incident et celle de l'axe optique c. Dans notre cas, elle est très proche de $\omega_{LO,\perp}$ car la différence des angles n'est que de 5°.

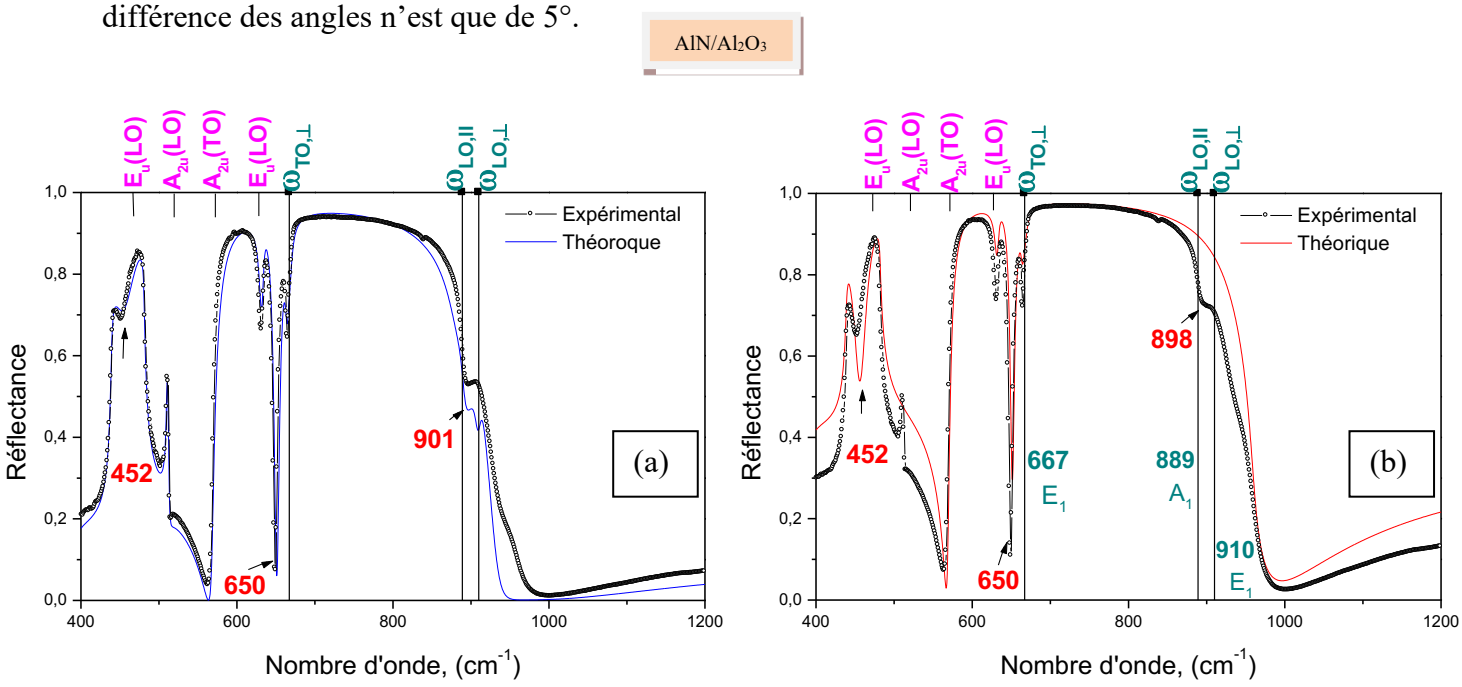


Figure 2.7: Spectres théorique et expérimental de réflectivité IR, en polarisation *p* (a) et *s* (b) de AlN wurtzite sur substrat de saphir (Al_2O_3) en incidence oblique ($\theta = 45°$). Les modes optiques de AlN et de saphir sont présentés en ligne vertical.

Les absorptions apparaissant à 452 cm^{-1} et 650 cm^{-1} (***figure 2.6 et 2.7***) sont des minimums de réflectivité.

➢ **Réflectométrie de AlN sur Silicium (Si)** (*échantillon PVD28*)

Les spectres de réflectivité pour un film mince de AlN déposé sur substrat silicium, est donné (***figure 2.8 et 2.9***). Pour le but de localiser des pics d'absorption qui correspondent à des polaritons de surface (SP). ***Les figures 2.8 et 2.9*** représentent respectivement les spectres de réflectivité en polarisation p (a) et s (b) en incidence quasi-normale ($\theta = 10°$) et en incidence oblique ($\theta = 45°$). Les absorptions apparaissant à 608, 889 et 910 cm^{-1} sont les modes propres de AlN.

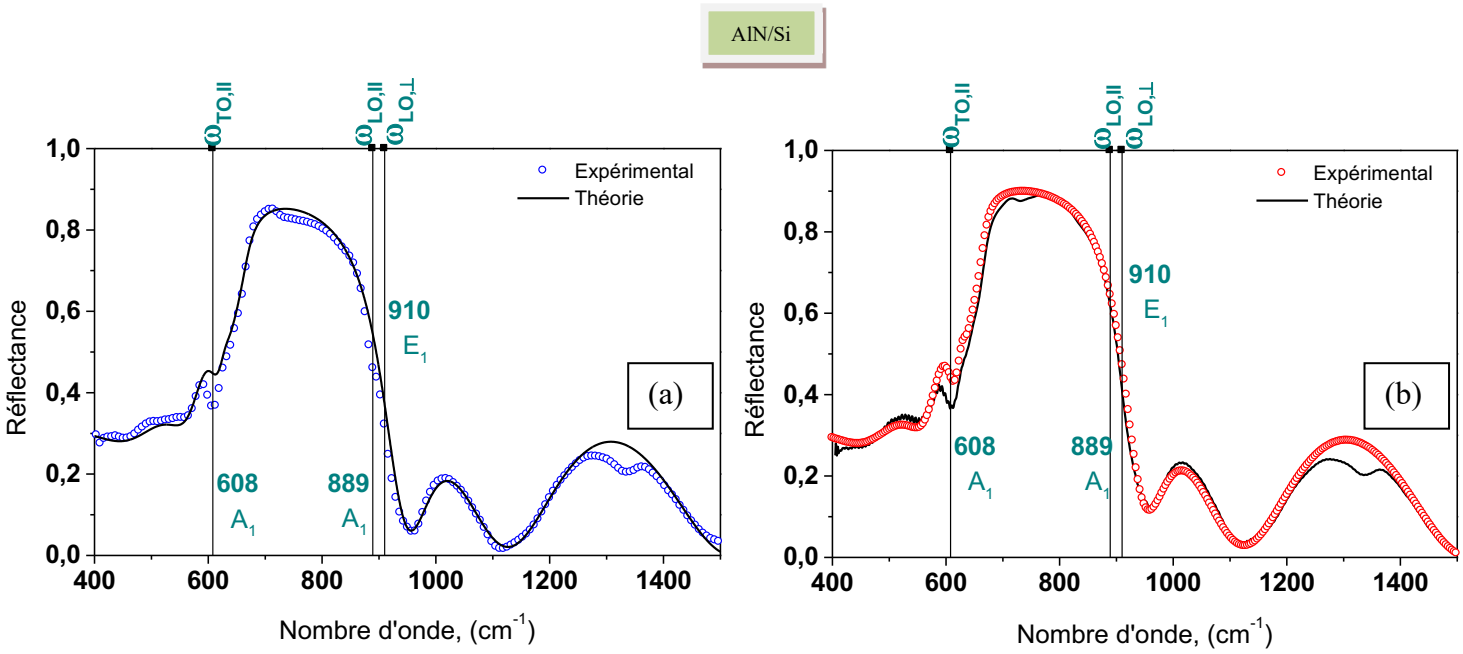


Figure 2.8: Spectres de réflectivité IR, en polarisation *p* (a) et *s* (b) de AlN wurtzite sur substrat de silicium (Si) en incidence quasi-normale ($\theta = 10°$).

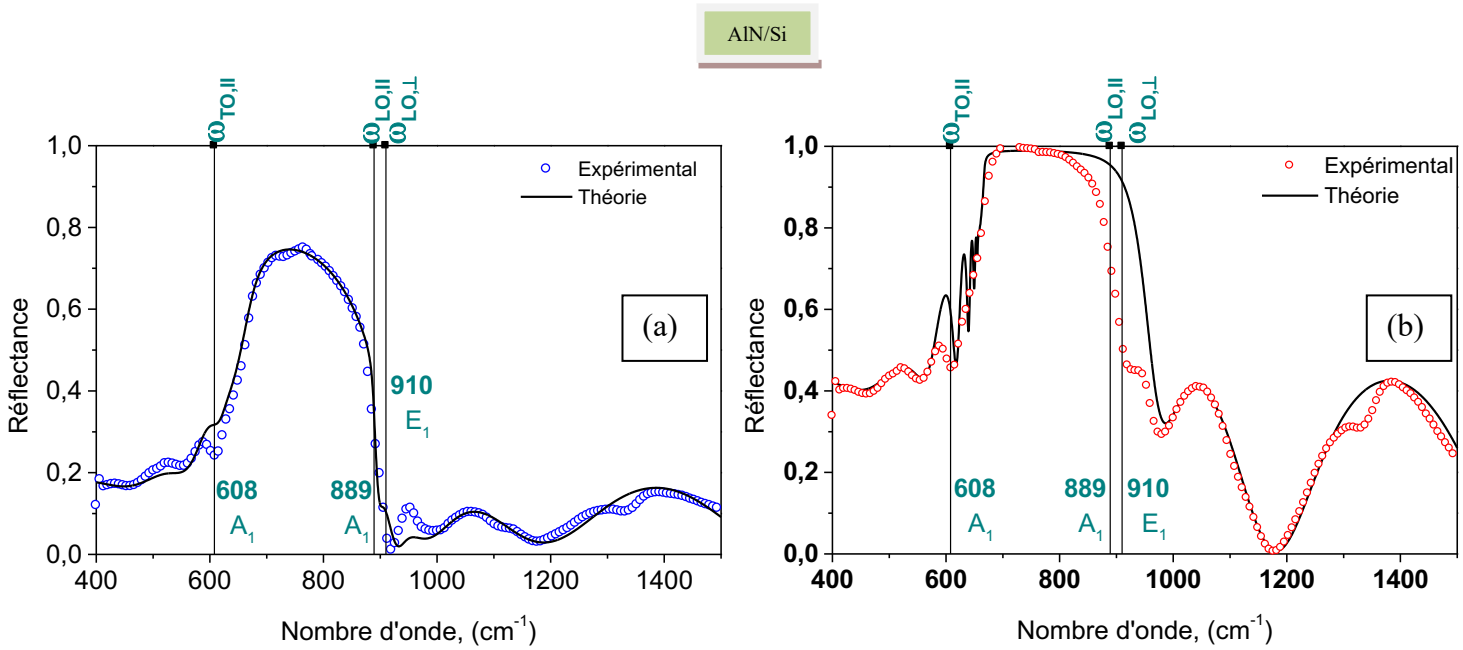


Figure 2.9: Spectres de réflectivité IR, en polarisation *p* (a) et *s* (b) de AlN wurtzite sur substrat de silicium (Si) en incidence oblique ($\theta = 45°$).

➢ **Réflectométrie de AlN sur substrats composites**

Pour la modélisation de la réflectivité IR de AlN sur substrat platine/saphir (*échantillon PT263*) (***la figure 2.10***) et sur substrat nitrure de titane sur silicium (*échantillon AlNTiN*) (***la figure 2.12***), on calcule la fonction diélectrique complexe de chacun des métaux ε_c : $\varepsilon_c = \varepsilon_1 + i\,\varepsilon_2 = n_c^2 = (n+ik)^2$

avec n et k respectivement l'indice de réfraction et d'extinction.

La fonction diélectrique des métaux est donnée par le modèle de Drude :

$$\varepsilon_c = \varepsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\omega_\tau} \qquad (\textbf{\textit{Eq.2.4}})$$

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \omega_\tau} \qquad (\textbf{\textit{Eq.2.5}})$$

$$\varepsilon_2 = \frac{\omega_\tau \omega_p^2}{\omega(\omega^2 + \omega_\tau^2)} \qquad (\textbf{\textit{Eq.2.6}})$$

où ε_∞ est la constante diélectrique en haute fréquence, ω est la fréquence angulaire, ω_p et ω_τ sont respectivement la fréquence plasma et la fréquence d'amortissement.

Métal	$\boldsymbol{\varepsilon_\infty}$	$\boldsymbol{\omega_p\ (cm^{-1})}$	$\boldsymbol{\omega_\tau\ (cm^{-1})}$
Platinium (**Pt**)	6,7	$4{,}15.10^4$	$5{,}58.10^2$
Nitrure de Titane (**TiN**)	5	$56{,}471.10^3$	$5{,}405.10^3$

Tableau 2.3: Les valeurs de la fréquence plasma et d'amortissement du Platine (Pt) [20] et du Nitrure de Titane (TiN) [21].

Les spectres de ***la figure 2.11*** présentent un focus de la région de *reststrahlen* de AlN (600-920 cm^{-1}). On observe une absorption à 830 cm^{-1} (***figure 2.11***) relative aux phonons polaritons de surface sur le spectre expérimentale. On observe un décalage du mode E1(TO) de 667cm^{-1} côté théorique à 660 cm^{-1} côté expérimental. Ce décalage peut être attribué soit aux quasi-modes et/ou à une contrainte résiduelle dans le film.

Dans le cas d'une contrainte résiduel dans le film de AlN, alors elle pourrait valoir $\sigma = 1.75$ GPa. Le calcul de cette contrainte est fait par résolution de l'équation [22] suivante :

$$\omega_{TO,cristal} = 660 + 3.99\sigma + 0.035\sigma^2 \qquad (\textbf{\textit{Eq.2.7}})$$

$$\omega_{TO,film} = 667\ cm^{-1}$$

Le pic d'absorption à 896cm^{-1} en polarisation p (***la figure 2.11(a)***) est attribué à l'effet Berreman.

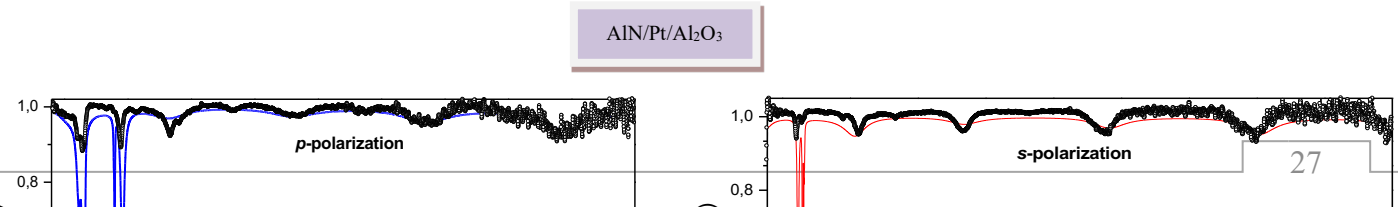


Figure 2.10: Spectres de réflectivité IR, en polarisation *p* (a) et s (b) ; les spectres expérimentaux (en gras) et théorique (couleurs bleue ou rouge) sous incidence rasante ($\theta = 85°$).

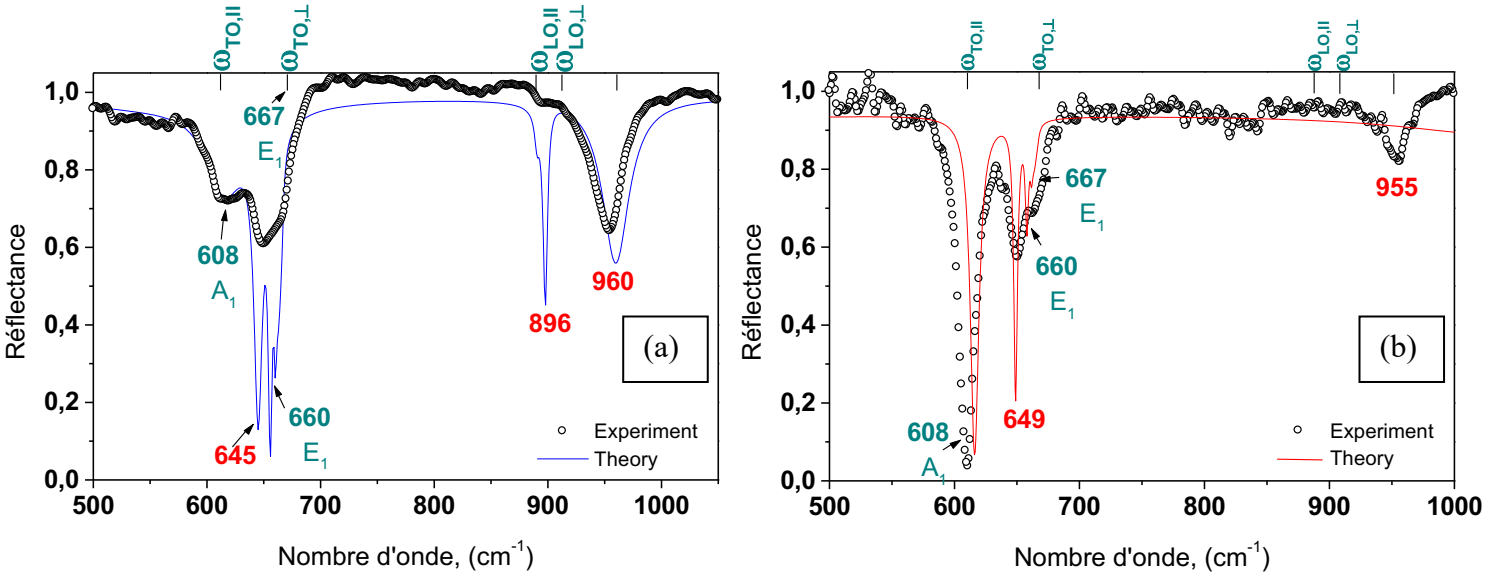


Figure 2.11: Zoome sur les spectres de réflectivité IR en polarisation *p* (a) et s (b) : spectres expérimentaux (motifs ronds) et théoriques (lignes pleines) de AlN sur substrat Pt/Al_2O_3 sous incidence rasante ($\theta = 85°$).

Les spectres de ***la figure 2.13*** présentent un focus de la région *reststrahlen* de AlN (600-920 cm^{-1}). Le mode E_1(TO) qui passe d'une fréquence de 667cm^{-1} côté théorique à 660cm^{-1} côté expérimental. Ce décalage peut être attribué soit aux quasi-modes et/ou à une contrainte résiduelle dans le film. Dans le cas d'une contrainte résiduel dans le film de AlN, alors elle pourrait valoir $\sigma = 1.75$ GPa.

Le pic d'absorption à 898cm^{-1} est visualiser en polarisation p (***la figure 2.13(a)***) est attribuée à l'effet Berreman.

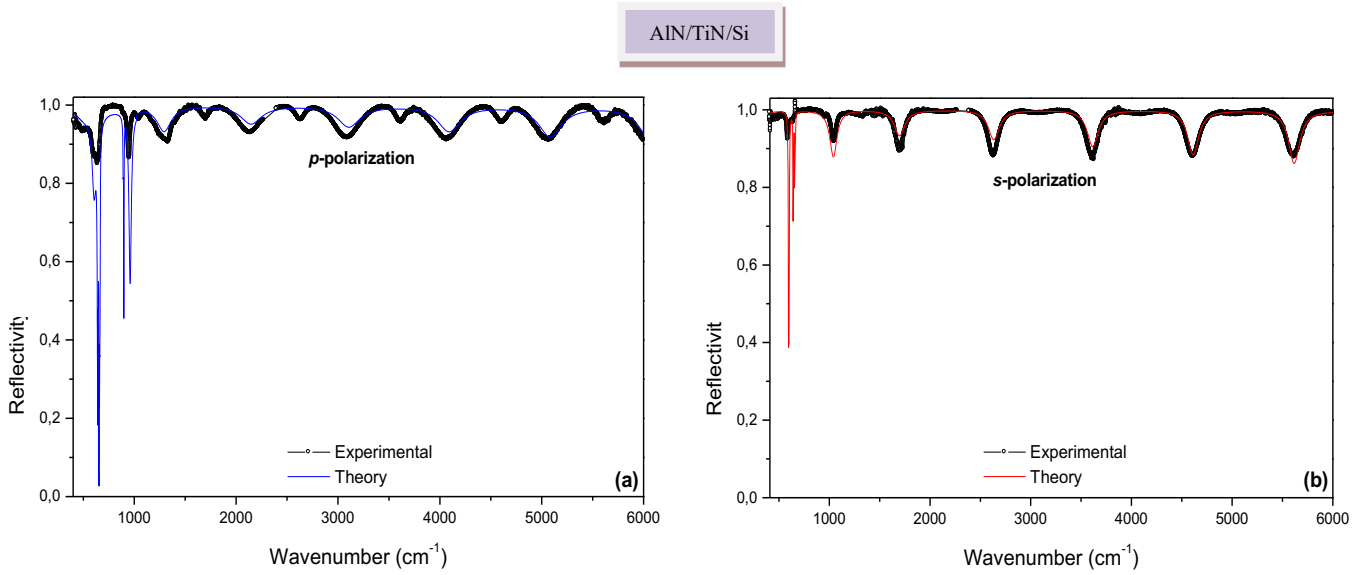


Figure 2.12: Spectres de réflectivité IR en polarisation *p* (a) et *s* (b) ; spectres expérimentaux (en gras) et théorique (couleurs bleue ou rouge) de AlN wurtzite sur TiN/Si en incidence rasante de ($\theta = 85°$).

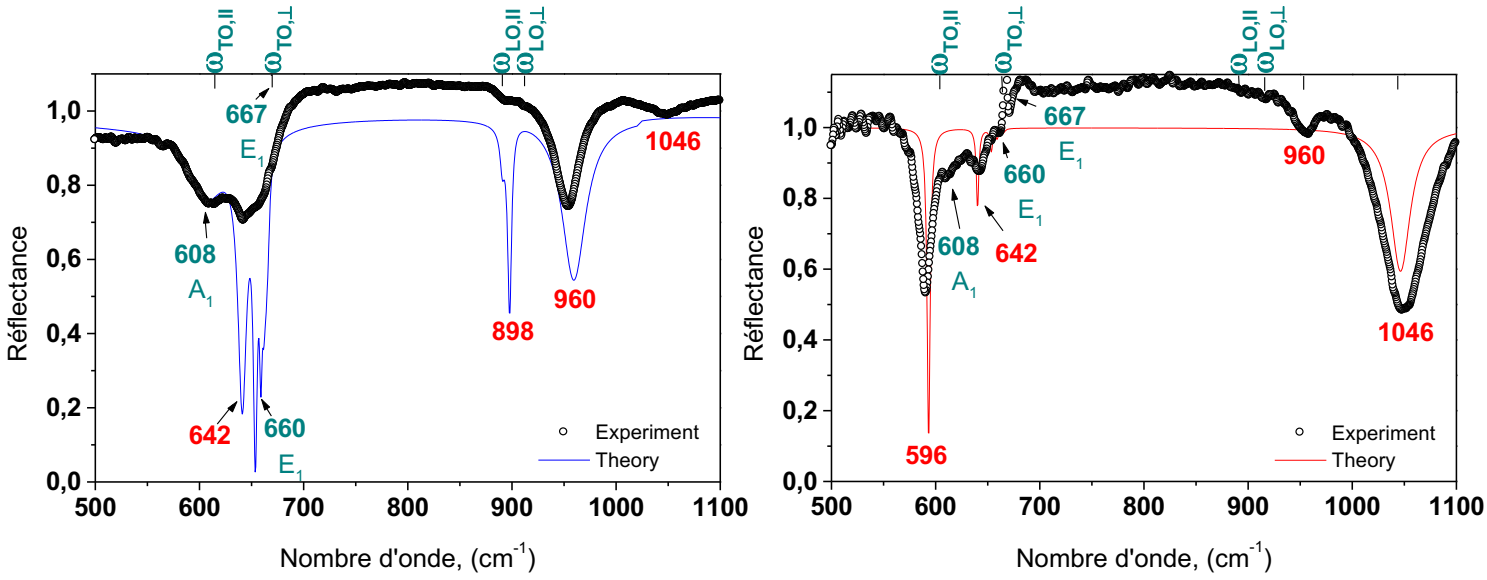


Figure 2.13: Zoom sur les spectres de réflexion IR en polarisation *p* (a) et *s* (b) : spectres expérimentaux (motifs ronds) et théoriques (lignes pleines) de AlN sur substrat TiN/Si sous incidence rasante ($\theta = 85°$).

IV- Définition du phonon-polariton de surface PPS

D'une manière générale, les polaritons sont des quasi-particules issues du couplage fort entre une onde lumineuse et une onde de polarisation électrique. Plusieurs cas de figure sont possibles en fonction de l'origine de l'onde de polarisation. Si l'onde de polarisation est un phonon optique, c'est-à-dire essentiellement l'oscillation mécanique de deux atomes de charge opposée à l'intérieur d'un cristal, alors on a des polaritons phononiques. La

condition à satisfaire pour qu'existe ce type de quasi-particule est très précise. Dans notre cas, les phonons-polaritons de surface sont des modes de vibrations transverses magnétiques résultants d'un couplage entre des photons en mode TM avec des phonons en mode TO exclusivement. Cette condition apparaît en surface ou aux interfaces entre 2 milieux de permittivités différentes et pour une gamme de fréquence donnée. En d'autres termes, le polariton de surface est une onde électromagnétique qui se propage à l'interface entre deux milieux, l'un d'eux est actif, c'est-à-dire que sa permittivité diélectrique est négative et l'autre est inactif (c'est-à-dire que sa permittivité diélectrique est positive). Les polaritons de surface peuvent être observés sur les courbes de réflectivité en infrarouge et en réflexion totale atténuée si les conditions de leur existence sont réunies. Les courbes de dispersion des phonons associés sont calculées pour certifier leur présence et les localiser sur le spectre.

V- Réflexion totale atténuée et courbes de dispersion des phonons

La réflexion totale atténuée (ATR) avec la configuration d'Otto [23] a été utilisé pour obtenir si possible des phonons-polaritons de surface sur nitrure d'aluminium observable directement sur la courbe de réflectivité ATR.

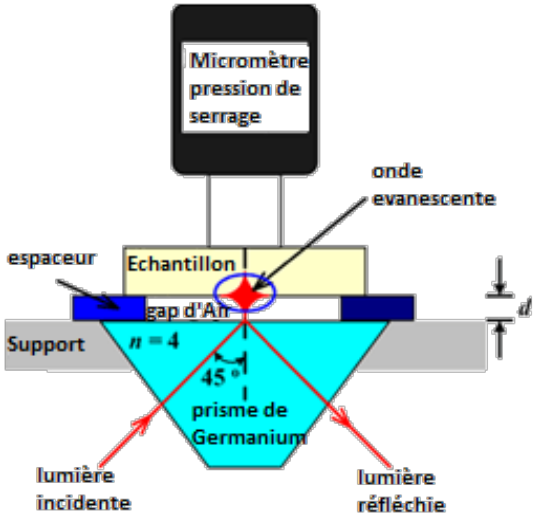


Figure 2.14: Schéma de principe d'un ATR.

Un angle d'incidence $\theta = 45°$ est utilisé pour faire les mesures expérimentales. L'indice du prisme de Germanium est $n_p = 4$; $(n_{air} = 1)$, l'angle critique $\theta_c = \arcsin\left(\frac{n_{air}}{n_p}\right) = 14.48°$, l'indice optique du film est n_f [24].

Pour localiser théoriquement ces phonons polaritons, il est nécessaire de calculer la courbe de dispersion des phonons du multicouches étudiée en partant de l'équation de dispersion dans la condition de leur existence.

Le calcul théorique de la courbe de dispersion des polaritons de surface (SP) a été mené par Mills et Maradudin en 1973 [25] en résolvant les équations de Maxwell dans la condition de l'existence des phonons polaritons. Le même procédé a été utilisé dans notre cas avec le multicouche air/film mince AlN wurtzite déposé sur substrat saphir ou silicium. Un exemple de schéma simplifié avec la propagation d'un PPS est montré ***figure 2.15*** suivant la direction (o,x) et le champ électrique dans le plan (x,z) (onde transverse magnétique TM).

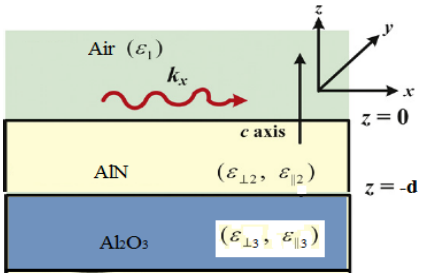


Figure 2.15: Schéma de la structure multicouche Air/AlN/Al_2O_3 ou Air/AlN/Si.

- **Etude théorique : AlN sur substrat Saphir.**

Rappelons que la condition de l'existence des polaritons de surface est obtenue lorsque les permittivités $\varepsilon_\perp$ de deux milieux séparés par un dioptre sont de signes opposés [26,27]. Par exemple, dans le cas de l'interface air/AlN, la permittivité $\varepsilon_{\perp,AlN}$ doit être négative car $\varepsilon_{\perp,air} = 1$. Il en est de même pour l'interface AlN/Al_2O_3, où la permittivité $\varepsilon_{\perp,AlN}$ doit être de signe opposé à $\varepsilon_{\perp,Al2O3}$ (***figure 2.16***). Cela permet de donner les différentes conditions pour obtenir soit des phonons polaritons réels, soit des phonons polaritons guidés dont on reviendra dans la suite de ce paragraphe (***tableau 2.5***).

À partir de la relation de dispersion (***annexe B***), il est possible de remonter à la courbe de dispersion des polaritons de surface après avoir résolu l'équation suivante :

$$\left(1+\frac{\alpha_0\epsilon_{2,\perp}}{\alpha_1\epsilon_1}\right)\left(1+\frac{\alpha_2\epsilon_{2,\perp}}{\alpha_1\epsilon_{3,\perp}}\right)-\exp(-2\alpha_1 d)\left(1-\frac{\alpha_0\epsilon_{2,\perp}}{\alpha_1\epsilon_1}\right)\left(1-\frac{\alpha_2\epsilon_{2,\perp}}{\alpha_1\epsilon_{3,\perp}}\right)=0 \qquad (\textbf{Eq.2.8})$$

où α_l est le facteur d'atténuation du champ électrique relative à chaque couche (0: air, 1: AlN, 2: Al_2O_3) [33].

$$\begin{cases} \alpha_0 = \left[k_x{}^2 - \left(\frac{\omega^2}{c^2}\right)\right]^{1/2} & (\textit{Eq. 2.9}) \\ \alpha_1 = \left[\frac{\epsilon_{2,\perp}}{\epsilon_{2,\parallel}} k_x{}^2 - \epsilon_{2,\perp}\left(\frac{\omega^2}{c^2}\right)\right]^{1/2} & (\textit{Eq. 2.10}) \\ \alpha_2 = \left[\frac{\epsilon_{3,\perp}}{\epsilon_{3,\parallel}} k_x{}^2 - \epsilon_{3,\perp}\left(\frac{\omega^2}{c^2}\right)\right]^{1/2} & (\textit{Eq. 2.11}) \end{cases}$$

En fonction du signe des différents paramètres contenus dans cette équation, il apparaît deux types de solutions, les phonons polaritons de surface réels (PPS suivant ox et le champ électrique suivant xz ou mode TM) et d'autres guidés (PPS suivant ox et un champ électrique suivant xy ou mode TE).

Les branches de la courbe de dispersion	$\boldsymbol{\varepsilon_1}$	$\boldsymbol{\varepsilon_2}$		$\boldsymbol{\varepsilon_3}$	$\boldsymbol{\propto_0}$	$\boldsymbol{\propto_1}$	$\boldsymbol{\propto_2}$	**Type du mode de surface**
	$\perp(\parallel)$	$\perp$	$\parallel$	$\perp(\parallel)$				
A	+ve[a]	-ve	-ve	-ve[b]	r[c]	r	r	PPS Réel
B	+ve	+ve	-ve	-ve	r	i[d]	r	Guidé
C	+ve	+ve	+ve	-ve	r	i	r	Guidé
D	+ve	+ve	+ve	-ve	r	i	r	Guidé

[a] Valeur positif.
[b] Valeur négatif.
[c] Valeur réel.
[d] Valeur imaginaire.

Tableau 2.4: Les conditions d'existence des polaritons de surface (SP).

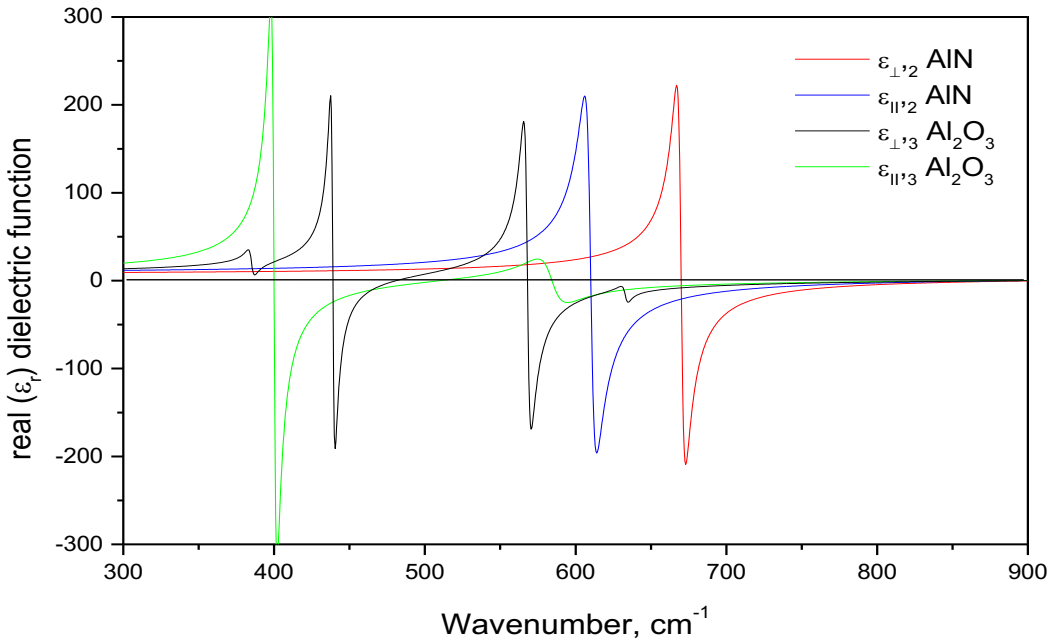


Figure 2.16: Parties réelles de la fonction diélectrique ε_r en polarisation p et s de AlN et du saphir.

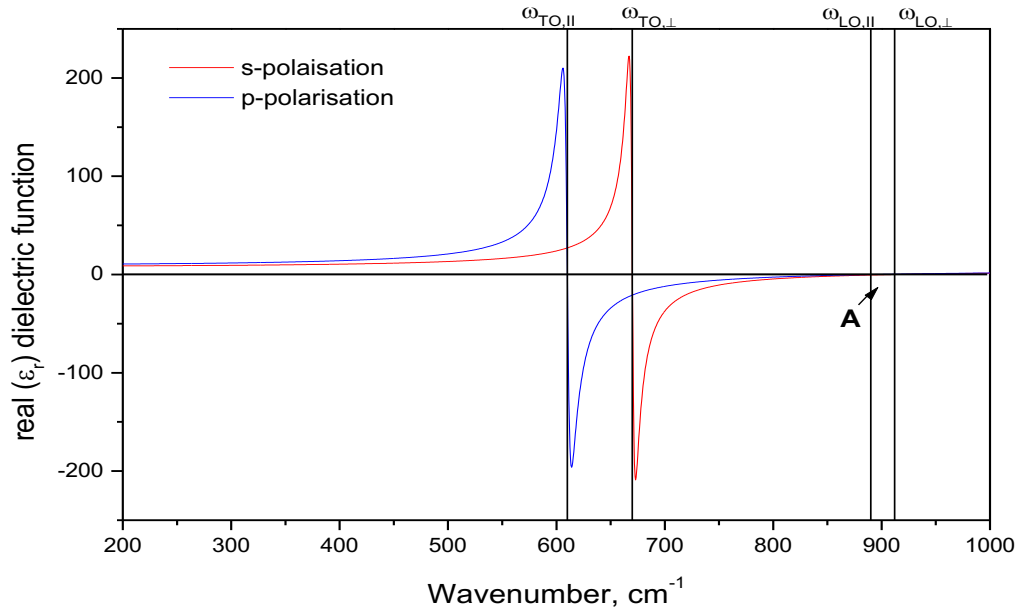


Figure 2.17: Partie réelle de la fonction diélectrique ε_r en polarisation p et s de AlN sur substrat saphir; les modes propres optiques de AlN sont présentés par des lignes verticales.

Après résolution de cette équation et pour toutes les configurations, les différentes solutions sont regroupées ***figure 2.18*** avec les courbes de dispersion des phonons polaritons de surface (a) (PPS) et des phonons polaritons en modes guidés (b) (GWP).

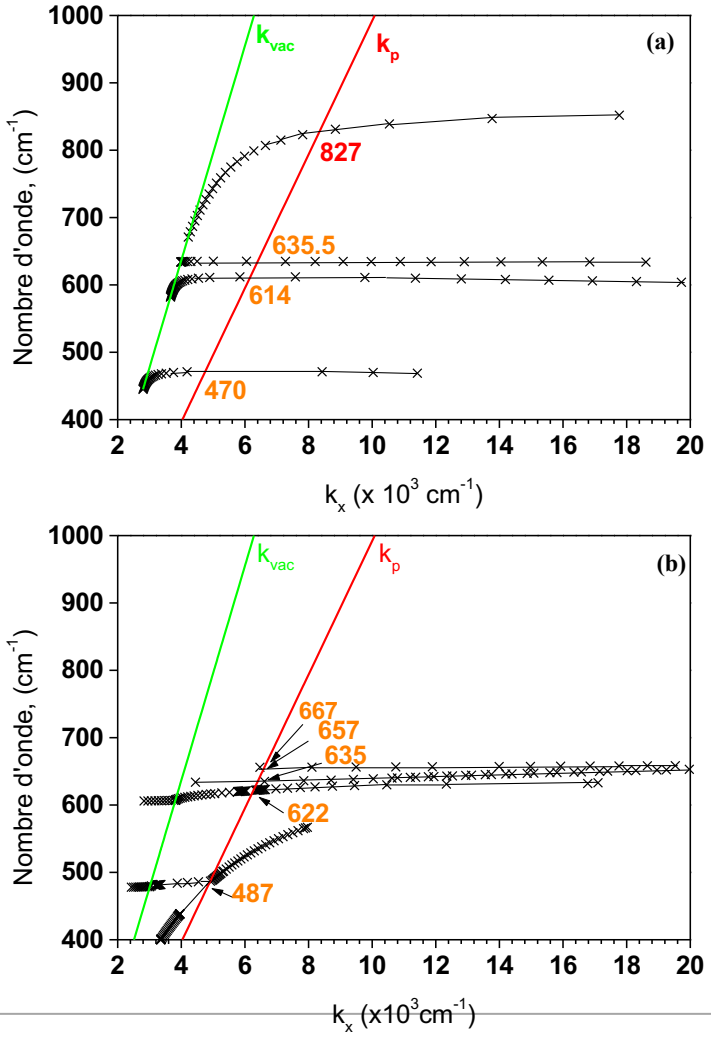


Figure 2.18: Calcul théorique des courbes de dispersion des polaritons de surface (a) et des polaritons d'ondes guidées (b) de AlN sur substrat saphir. Les vecteurs d'ondes du vide et du prisme de germanium ($n_p = 4$) sont respectivement indiqués par k_{vac} et k_p.

- **Mesure expérimentale : AlN sur substrat Saphir**

La figure 2.19 montre la réflexion totale atténuée en lumière naturelle de AlN sur un substrat saphir. On s'intéresse au pic d'absorption qui apparait à 827cm^{-1} laquelle est attribuée à un phonon-polariton de surface. Ce pic correspond à l'intersection entre la courbe de dispersion de polariton de surface (SP) et le vecteur d'onde du prisme (k_p) à 45° d'incidence (***figure 2.18(a)***). Il apparaît effectivement quand la partie réel $\varepsilon_{\perp}(\omega)$ de la fonction diélectrique de AlN est négatif (***figure 2.16***). L'absorption positionnée à 900cm^{-1} est attribuée au mode longitudinal optique de AlN du à l'effet Berreman: elle est effectivement observée quand la partie réelle de la fonction diélectrique de la couche mince de AlN s'annule (***figure 2.17, région A***) [28].

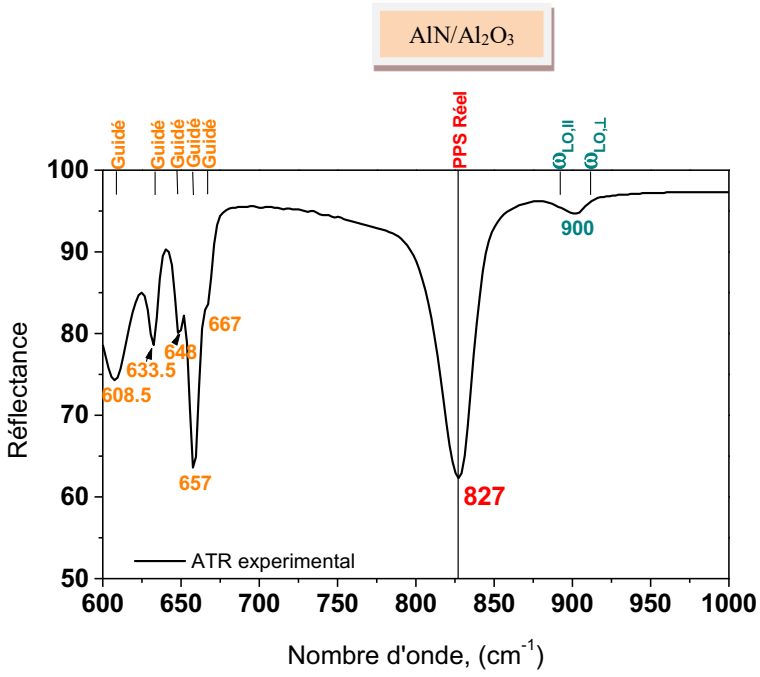


Figure 2.19: Spectre expérimental en ATR d'un film mince de AlN/Saphir.

D'après la courbe de dispersion des phonons polaritons de surface (***figure 2.18(b)***), les absorptions à 608.5, 633.5, 657 et 667cm^{-1} correspondent à des phonons polaritons en modes guidés (GWP). Celui à 487 cm^{-1} n'est pas mesurable avec notre dispositif et le dernier à 622 cm^{-1} en théorie doit être noyé avec celui à 608.5 cm^{-1} dans la gamme spectrale où le rapport signal à bruit de la mesure est fortement dégradé (pic élargie).

➢ Etude théorique : AlN sur substrat du Silicium

La géométrie et les coordonnés du système à étudier sont décrit sur ***la figure 2.20***.

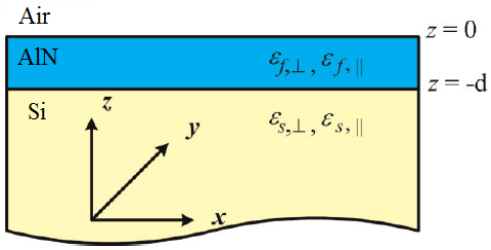


Figure 2.20: La géométrie et les coordonnés du système utilisé, les indices $(f: film;\ s: substrat;\ d: l'épaisseur\ du\ film)$ [29].

Nous avons précédemment localisé les polaritons de surface pour une structure Air/wAlN/Al_2O_3 et nous adoptons la même théorie pour le calcul de AlN sur silicium en prenant la permittivité du substrat de silicium réel tel que $\varepsilon_{s,\perp} = \varepsilon_{s,||} = 11.9$. La relation de la dispersion obtenue est la suivante :

$$(\alpha_f \varepsilon_{air} + \alpha_{air}\varepsilon_{f,\perp})(\alpha_f \varepsilon_s + \alpha_s \varepsilon_{f,\perp}) - (\alpha_f \varepsilon_{air} - \alpha_{air}\varepsilon_{f,\perp})(\alpha_f \varepsilon_s - \alpha_s \varepsilon_{f,\perp}) \exp(-2\alpha_f d) = 0 \qquad (\textbf{\textit{Eq.2.12}})$$

où f et s sont respectivement le film de AlN et le substrat Silicium ;

$\alpha_{air} = [k^2 - (\frac{\omega^2}{c^2})]^{1/2}$, $\alpha_f = [(\frac{\varepsilon_{f,\perp}}{\varepsilon_{f,||}})k^2 - (\frac{\omega^2}{c^2})\varepsilon_{f,\perp}]^{1/2}$ et $\alpha_s = [k^2 - (\frac{\omega^2}{c^2})\varepsilon_s]^{1/2}$

α_{air}, α_f et α_s sont réels respectivement, à condition que :$k > \frac{\omega}{c}$, $k > (\frac{\omega}{c})(\varepsilon_{f,||})^{1/2}$ et $k > (\frac{\omega}{c})(\varepsilon_s)^{1/2}$

En fonction du signe des différents paramètres contenus dans cette équation, il apparaît uniquement des phonons polaritons de surface .

Les branches de la courbe de dispersion	ε_{air}	ε_f	ε_s	$\propto_{air}$	$\propto_f$	$\propto_s$	**Type du mode de surface**
	$\perp(\|\|)$	$\perp(\|\|)$	$\perp(\|\|)$				
	+ve[a]	-ve[b]	+ve	r[c]	r	r	Réel PPS

[a] Valeur positif.
[b] Valeur négatif.
[c] Valeur réel.

Tableau 2.5: Les conditions d'existences du polariton de surface (SP).

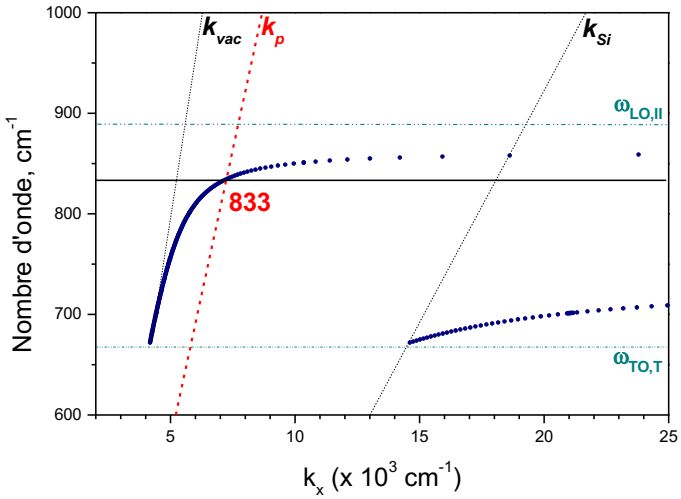


Figure 2.21: Calcul théorique de la courbe de dispersion des phonons polaritons de surface de AlN sur substrat silicium (Si). k_{si} correspond au vecteur d'onde du substrat silicium, les vecteurs d'ondes dans le vide et dans le prisme de germanium ($n_p = 4$) sont indiqués respectivement par k_{vac} et k_p, en angle d'incidence ($\theta = 45°$).

- **Mesure expérimentale :w-AlN sur substrat Silicium**

La figure 2.22 montre la réflexion totale atténuée en lumière naturelle de AlN sur substrat silicium. L'absorption à 833 cm^{-1} correspond aux phonons-polaritons de surface. Ce pic correspond à l'intersection entre la courbe de dispersion des phonons de surface et le vecteur d'onde du prisme (k_p) (***figure 2.21***).

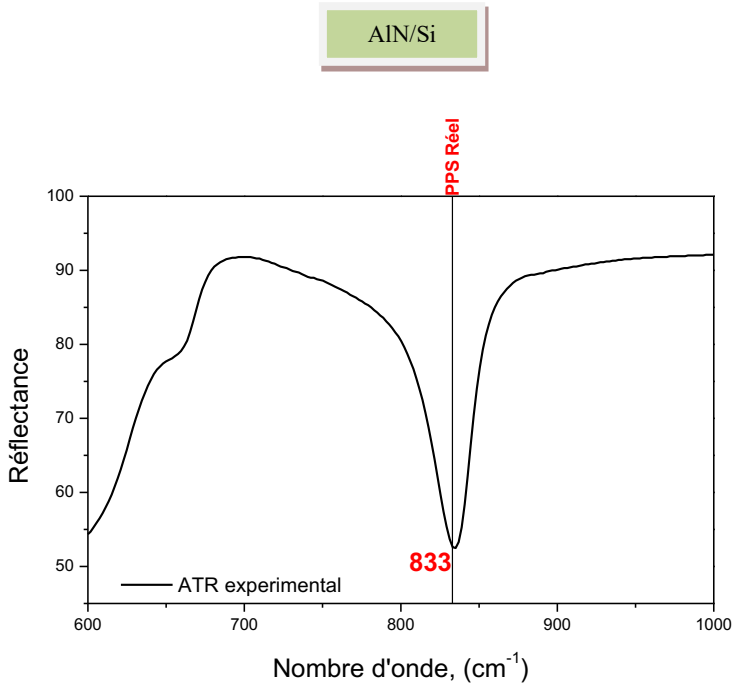


Figure 2.22: Spectre expérimental en ATR de AlN sur substrat Silicium en incidence oblique ($\theta = 45°$) et avec un prisme de germanium ($n_p = 4$).

➢ **Etude théorique : AlN sur substrat composite Pt/Al_2O_3**

Nous adoptons la même théorie pour le calcul de AlN sur platine. La relation de la dispersion obtenue est la suivante :

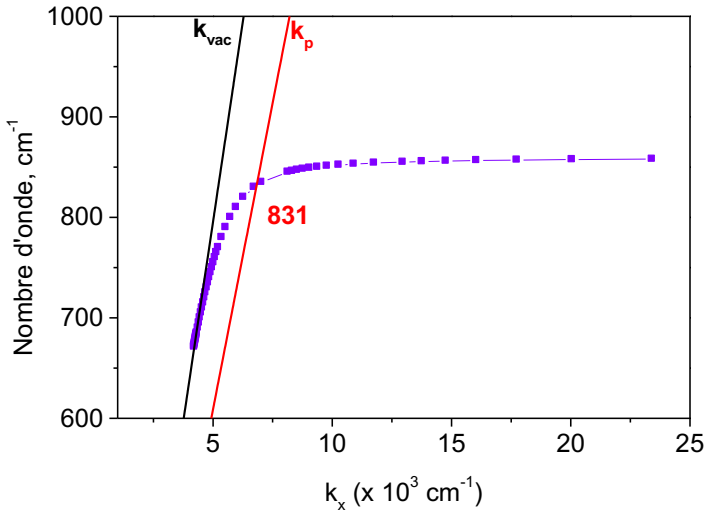


Figure 2.23: Calcul théorique de la courbe de dispersion des phonons polaritons de surface de AlN sur substrat platine (Pt), les vecteurs d'ondes dans le vide et dans le prisme de germanium sont indiqués respectivement par k_{vac} et k_p, en angle d'incidence ($\theta = 45°$).

➢ **Mesure expérimentale :w-AlN sur substrat composite Pt/Al_2O_3**

La figure 2.24 montre la courbe expérimentale de la réflexion totale atténuée en lumière naturelle de wAlN sur une couche de platine épitaxiée sur substrat saphir (Pt/Al_2O_3). L'absorption à 830cm^{-1} est attribuée aux phonons-polaritons de surface (PPS). Les courbes de dispersion n'ont pas été calculées car la structure à quatre couches (Air/AlN/Pt/Al_2O_3) complique considérablement les calculs. En effet, la résolution de ce système doit passer par des méthodes matricielles. Le développement d'une telle méthode aurait nécessité du temps dont je ne disposais plus au cours de ce stage.

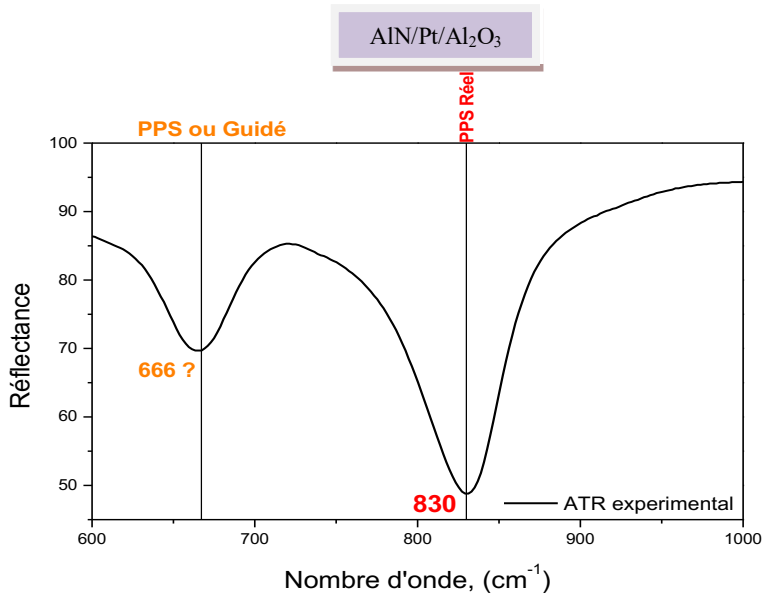


Figure 2.24: Spectre expérimental en ATR de AlN sur substrat Platine/Al_2O_3.

CONCLUSION GÉNÉRALE

Ce stage m'a permis d'avoir un aperçu plus précis du monde de la recherche et d'appliquer mes connaissances pour tenter de résoudre un problème concret. J'ai mené une étude expérimentale puis théorique permettant la mise en évidence de phonons-polaritons de surface pour des films minces de nitrure d'aluminium sur substrat saphir, silicium et substrats composites Pt/Al203 et TiN/Si. A partir des courbes de dispersion calculées, j'ai pu expliquer l'apparition de phonons polaritons en modes guidés ou non guidés au moyen de la technique ATR ainsi que des absorptions attribués à l'effet Berreman. Tous ces résultats n'ont été validés que sur des couches piézoélectriques.

La mise en évidence de l'apparition de phonons polaritons de surface pour des films minces de nitrure d'aluminium wurtzite s'est avérée être une hypothèse réaliste. Cette idée soumise au début de l'étude, bien que vérifiée, nécessite d'être appliquée quantitativement sur d'autres couches piézoélectriques en relation avec l'orientation des grains que l'on peut déduire de mesures en spectroscopie infrarouge en incidence normale et oblique et les combiner avec des résultats expérimentaux à l'aide de composants comme les dispositifs acoustiques de surface. Il sera alors possible d'établir un modèle physique qui puisse expliquer le comportement piézoélectrique de films minces pour définir à terme les conditions à satisfaire pour concevoir des composants plus performants. Cette étude pourra être transposée à d'autres matériaux disponibles dont la fonction reste la même que le nitrure d'aluminium.

RÉFÉRENCES

[1]: S.Fanget, Thèse de doctorat, Matériaux et hétérostructures à base de nitrures d'éléments III en phase cubique et hexagonale pour l'optoélectronique, INSA Lyon (2002) 02 ISAL.

[2]: J.Zhu, D.Zhao, W.B Luo, Y.Zhang, Y.R.Li, Journal of Crystal Growth 310 (2008) 731-737.

[3]: A. Zoroddu, F. Bernardini, P.Ruggerone And V.Fiorentini, Physical Review B, Vol 64 (2001) 45208.

[4]: S.Inoue, K.Okamoto, N.Matsuki, T.W. Kim, H.Fujioka, Journal Of Crystal Growth, 289 (2006) 574-577.

[5]: M.Razehhi, A.Rogalski, Journal Of Applied Physics, Vol.79 N°10 (1996) 7433.

[6]: M.Akiyama, K.Nagao, N.Ueno, H.Tateyama, T.Yamada, Vaccum 74 (2004) 699-703.

[7]: G. Radhakrishnan, Journal Of Applied Physics 78 (1995) 6000-6005.

[8]: Y.Q.Fu, J.K.Luo, X.Y.Du, A.J.Flewitt, Y.Li, G.H.Markx, A.J.Walton and W.I.Milne, Sensors and Actuators B 143 (2010) 606-619.

[9]: G.Li, Tw. Kim, S.Inoue, K. Okamoto, H.Fujioka, Applied Physic Letters, 89 (2006) 241905.

[10]: H.Zhang, J.M.Liu, F.X.Lu, Applied Surface Sciences 253 (2007) 3571.

[11]: F.Bernardini, V.Fiorentini, D.Vanderbilt, Physical Review B Vol 56 N°16 (1997) 10024-10027.

[12]: O.Ambacher, J.Smart, J.R.Shealy, N.G. Neimann, K.Chu, M.Murphy, W.J.Schaff, L.F.Eastmam, R.Dimitrov, L.Wittmer, M. Stutzmann, W.Rieger and J.Hilsenbeck, Journal Of Applied Physics Vol 85 N) 6 (1999) 3222-3233.

[13]: A. Zoroddu, F. Bernardini, P.Ruggerone And V.Fiorentini, Physical Review B, Vol 64 (2001) 45208.

[14]: C.A.Arguello et all, First ordre Raman effect in wurtzite type-crystals. Phys. Rev,181,3,1351(1969).

[15]: T.Dumelow, T.J.Barker, S.R.P.Smith, D.R.Tilley, Surf. Sci. Rep. 17(1993)151.

[16]: J. G. Tischler and J. A. Freitas, Jr., Appl. Phys. Lett.85, 1943 (2004).

[17]: M. Schubert, T.E. Tiwald, C.M. Herzinger, Phys. Rev. B. 61 (2000) 8187.

[18]: E. F. Venger, A. V. Melnichuk, L. Yu. Melnichuk, and Yu. A. Pasechnik, Phys. Status Solidi B 188, 823 (1995).

[19]: D. W. Berreman, Phys. Rev. 130, 2193 (1963).

[20]: M. A. Ordal, Robert J. Bell, R. W. Alexander, Jr, L. L. Long, and M. R. Querry 15 December 1985 / Vol. 24, No. 24 / APPLIED OPTICS.

[21]: Sadao Adachi and Mitsutoshi Takahashi Journal of Applied Physics 87, 1264 (2000); doi: 10.1063/1.372006.

[22]: PRB, Vol- 47 (5), 1993, page 2876-2877 P. Perlin, A.Polian.

[23]: A. Otto, Z. Phys. 216, 398 (1968).

[24]: S. S. Ng, Z. Hassan, and H. Abu Hassan: Solid State Commun. 145 (2008) 535.

[25]: D. L. Mills and A. A. Maradudin, Phys. Rev. Lett. 31, 372 (1973).

[26]: Y. Y. Chu and J. B. Bates, Phys. Rev. B 34, 2757-2761 (1986).

[27]: T. Dumelow, A. A. Hamilton, T. J. Parker, D. R. Tilley, C. T. B. Foxon, D. Hilton, and K. J. Moore: Int. J. Infrared Millimeter Waves 11 (1990) 901.

[28]: V. Offermann, P. Grosse, M. Feuerbacher, and G. Dittmar, Vib. Spectrosc. 8, 135 (1995).

[29]: S.S. Ng, P.K. Ooi, S.C. Lee, M.J. Abdullah, Z. Hassan, H. Abu Hassan, Phys. Status Solidi B 249 (2012) 1058.

[30]: S. C. Lee, S. S. Ng, N. H. Al-Hardan, M. J. Abdullah, Z. Hassan, and H. Abu Hassan: Thin Solid Films 519 (2011) 3703.

[31]: S. C. Lee, S. S. Ng, H. Abu Hassan, Z. Hassan, and T. Dumelow, Thin Solid Films 551, 114-119 (2014).

ANNEXE A

Dans cette annexe sont développées les équations utilisées pour simuler les de réflectivité infrarouge :

Dans le cas d'une lumière polarisée :

Les équations pour R_p et R_s :

$$R_p = \frac{r_{01p}+r_{12p}e^{i2\beta_e}}{1+r_{01p}r_{12p}e^{i2\beta_e}} \quad (1.1)$$

$$R_s = \frac{r_{01s}+r_{12s}e^{i2\beta_o}}{1+r_{01s}r_{12s}e^{i2\beta_o}} \quad (1.2)$$

Les équations de Fresnel donnent pour un film mince :

$$r_{01p} = (N_{oa} - N_{ae})/(N_{oa} + N_{ae}) \quad (1.3)$$

$$r_{12p} = (N_{fe} - N_{of})/(N_{fe} + N_{of}) \quad (1.4)$$

$$r_{01s} = (N_{aa} - N_{oo})/(N_{aa} + N_{oo}) \quad (1.5)$$

$$r_{12s} = (N_{00} - N_{ff})/(N_{00} + N_{ff}) \quad (1.6)$$

Avec les déphasages introduits par l'épaiseur de la couche :

$$\beta_0 = k_0 d N_0 \cos(F_0) \quad (1.7)$$

$$\beta_e = k_0 d N_0 \cos(F_e) \quad (1.8)$$

La loi de Snell-Descartes peut d'écrire sous la forme :

$$\cos(F_i) = \sqrt{1 - \left(\frac{N_a}{N_i}\sin(F)\right)^2} \quad (1.9)$$

Avec pour les notations utilisées :

$$N_{ij} = N_i \cos(F_j) \quad (1.10)$$

$$N_i = (n_i + ik_i) = \sqrt{Re(\varepsilon_i) + iIm(\varepsilon_i)} \quad (1.11)$$

Pour les indices, nous avons utilisé les notations suivantes :

a : Désigne l'air ambiant

f :Désigne le substrat

o :Désigne la composante ordinaire des constantes optiques

e : Désigne la composante extraordinaire des constantes optiques

F :Désigne l'angle

Notons un point sensible pour le calcul de la simulation :

$$k_0 = \frac{\omega}{c} \qquad (1.12)$$

d : Désigne l'épaisseur en micromètre

ANNEXE B

Les équations de Maxwell associées à l'existence de phonons-polaritons de surface sont :

$$\begin{cases} -\dfrac{d^2E_x}{dz^2} + ik_x\dfrac{dE_z}{dz} = \dfrac{\omega^2}{c^2}D_x & (1.1) \\ ik_x\dfrac{dE_x}{dz} + {k_x}^2E_z = \dfrac{\omega^2}{c^2}D_z & (1.2) \\ H_y = \dfrac{c}{i\omega}\left(\dfrac{dE_x}{dz} - ik_xE_z\right) & (1.3) \end{cases}$$

E et H sont respectivement la composante électrique et magnétique, D est l'induction électrique, ω la fréquence angulaire, c la célérité et k_x le vecteur d'onde du polariton de surface suivant x.

Niveau de la couche	L'induction électrique
Air	$\vec{D} = \epsilon_1 \vec{E}$
AlN	$D_{2,x}(z) = \epsilon_{2,\perp} E_{2,x}(z)\ ;\ D_{2,z}(z) = \epsilon_{2,\parallel} E_{2,z}(z)$
Al_2O_3	$D_{3,x}(z) = \epsilon_{3,\perp} E_{3,x}(z)\ ;\ D_{3,z}(z) = \epsilon_{3,\parallel} E_{3,z}(z)$

Tableau 4.1: L'induction électrique pour chaque couche de l'échantillon Air/AlN/Al2O3.

Les indices x et z correspond respectivement aux composantes du champ électrique et de l'induction suivant l'axe x et z.

	Les solutions des équations de Maxwell		
Air	$E_{1,x}(z) = A^{(1)}\exp(-\alpha_0 z)$	$E_{1,z}(z) = A^{(1)}\dfrac{ik_x}{\alpha_0}\exp(-\alpha_0 z)$	$H_{1,y}(z) = A^{(1)}\dfrac{\omega\epsilon_1}{ic\alpha_0}\exp(-\alpha_0 z)$
AlN	$E_{2,x}(z) = B^{(1)}\exp(\alpha_1 z) + B^{(2)}\exp(-\alpha_1 z)$	$E_{2,z}(z) = \dfrac{k_x}{i\alpha_1}\left[B^{(1)}\exp(\alpha_1 z) - B^{(2)}\exp(-\alpha_1 z)\right]$	$H_{2,y}(z) = \dfrac{\omega\epsilon_{2,\perp}}{ic\alpha_1}\left[B^{(1)}\exp(\alpha_1 z) - B^{(2)}\exp(-\alpha_1 z)\right]$
Al_2O_3	$E_{3,x}(z) = C^{(1)}\exp(\alpha_2 z)$	$E_{3,z}(z) = C^{(1)}\dfrac{k_x\epsilon_{3,\perp}}{i\alpha_2\epsilon_{3,\parallel}}\exp(\alpha_2 z)$	$H_{3,y}(z) = -C^{(1)}\dfrac{\omega\epsilon_{3,\perp}}{ic\alpha_2}\exp(\alpha_2 z)$

Tableau 4.2: Les solutions des équations (***1.1***), (***1.2***) et (***1.3***) de chaque couche de la structure.

Avec α_l le facteur d'atténuation du champ électrique relative à chaque couche (0: air, 1: AlN, 2: Al_2O_3).

$$\begin{cases} \alpha_0 = \left[{k_x}^2 - \left(\dfrac{\omega^2}{c^2}\right)\right]^{1/2} & (1.4) \\ \alpha_1 = \left[\dfrac{\epsilon_{2,\perp}}{\epsilon_{2,\parallel}}{k_x}^2 - \epsilon_{2,\perp}\left(\dfrac{\omega^2}{c^2}\right)\right]^{1/2} & (1.5) \\ \alpha_2 = \left[\dfrac{\epsilon_{3,\perp}}{\epsilon_{3,\parallel}}{k_x}^2 - \epsilon_{3,\perp}\left(\dfrac{\omega^2}{c^2}\right)\right]^{1/2} & (1.6) \end{cases}$$

$$\vec{D} = \epsilon_1 \vec{E} \quad avec\ \epsilon_1 = \epsilon_0 . \epsilon_{air}$$

$$\begin{cases} E_{1,x}(z) = A^{(1)} \exp(-\alpha_0 z) & (2.1) \\ E_{1,y}(z) = 0 & (2.2) \\ E_{1,z}(z) = A^{(1)} \dfrac{ik_x}{\alpha_0} \exp(-\alpha_0 z) & (2.3) \end{cases}$$

$$\begin{cases} H_{1,x}(z) = 0 & (2.4) \\ H_{1,y}(z) = A^{(1)} \dfrac{\omega \epsilon_1}{ic\alpha_0} \exp(-\alpha_0 z) & (2.5) \\ H_{1,z}(z) = 0 & (2.6) \end{cases}$$

$$\alpha_0 = \left[{k_x}^2 - \left(\frac{\omega^2}{c^2} \right) \right]^{1/2} \quad (2.7)$$

$$\boldsymbol{D_{2,x}(z) = \epsilon_{2,\perp} E_{2,x}(z)\ ;\ D_{2,z}(z) = \epsilon_{2,\parallel} E_{2,z}(z)}$$

$$\begin{cases} E_{2,x}(z) = B^{(1)} \exp(\alpha_1 z) + B^{(2)} \exp(-\alpha_1 z) & (3.1) \\ E_{2,y}(z) = 0 & (3.2) \\ E_{2,z}(z) = \dfrac{k_x}{i\alpha_1} \left[B^{(1)} \exp(\alpha_1 z) - B^{(2)} \exp(-\alpha_1 z) \right] & (3.3) \end{cases}$$

$$\begin{cases} H_{2,x}(z) = 0 & (3.4) \\ H_{2,y}(z) = \dfrac{\omega \epsilon_{2,\perp}}{ic\alpha_1} \left[B^{(1)} \exp(\alpha_1 z) - B^{(2)} \exp(-\alpha_1 z) \right] & (3.5) \\ H_{2,z}(z) = 0 & (3.6) \end{cases}$$

$$\alpha_1 = \left[\frac{\epsilon_{2,\perp}}{\epsilon_{2.\parallel}} {k_x}^2 - \epsilon_{2,\perp} \left(\frac{\omega^2}{c^2} \right) \right]^{1/2} \quad (3.7)$$

$$\boldsymbol{D_{3,x}(z) = \epsilon_{3,\perp} E_{3,x}(z)\ ;\ D_{3,z}(z) = \epsilon_{3,\parallel} E_{3,z}(z)}$$

$$\begin{cases} E_{3,x}(z) = C^{(1)} \exp(\alpha_2 z) & (4.1) \\ E_{3,y}(z) = 0 & (4.2) \\ E_{3,z}(z) = C^{(1)} \dfrac{k_x \epsilon_{3,\perp}}{i\alpha_2 \epsilon_{3.\parallel}} \exp(\alpha_2 z) & (4.3) \end{cases}$$

$$\begin{cases} H_{3,x}(z) = 0 & (4.4) \\ H_{3,y}(z) = -C^{(1)} \dfrac{\omega \epsilon_{3.\perp}}{ic\alpha_2} \exp(\alpha_2 z) & (4.5) \\ H_{3,z}(z) = 0 & (4.6) \end{cases}$$

$$\alpha_2 = \left[\frac{\epsilon_{3,\perp}}{\epsilon_{3.\parallel}} {k_x}^2 - \epsilon_{3,\perp} \left(\frac{\omega^2}{c^2} \right) \right]^{1/2} \quad (4.7)$$

En remplaçant z par $z = 0$ (interface Air/AlN) et $z = -d$ (interface AlN/Al_2O_3) dans les solutions des équations de Maxwell (***Eq.4.1***) et (***Eq.4.2***) pour chaque couche, on trouve $B^{(1)}, B^{(2)} et\ C^{(1)}$ en fonction de $A^{(1)}$. Avec d : L'épaisseur du film d'AlN

À $z = 0$:

$$E_{tan,1} = E_{tan,2}$$

$$\begin{cases} E_{1,x}(0) = E_{2,x}(0) \\ A^{(1)} = B^{(1)} + B^{(2)} \end{cases}$$

$$D_{nor,1} = D_{nor,2}$$

$$\begin{cases} E_{1,z}(0) = \epsilon_{2,.\|} E_{2,z}(0) \\ A^{(1)} \dfrac{ik_x}{\alpha_0} = \epsilon_{2,.\|} \dfrac{k_x}{i\alpha_1} \left(B^{(1)} - B^{(2)}\right) \\ A^{(1)} = -\dfrac{\alpha_0}{\alpha_1} \epsilon_{2,.\|} \left(B^{(1)} - B^{(2)}\right) \end{cases}$$

$$\begin{cases} B^{(1)} = \dfrac{1}{2}\left[1 - \dfrac{\alpha_0 \epsilon_{2,.\|}}{\alpha_1}\right] A^{(1)} \quad (a) \\ B^{(2)} = \dfrac{1}{2}\left[1 + \dfrac{\alpha_0 \epsilon_{2,.\|}}{\alpha_1}\right] A^{(1)} \quad (b) \end{cases}$$

À $z = -d$:

$$E_{tan,2} = E_{tan,3}$$

$$\begin{cases} E_{2,x}(-d) = E_{3,x}(-d) \\ B^{(1)} \exp(-\alpha_{1d}) + B^{(2)} \exp(\alpha_1 d) = C^{(1)} \exp(-\alpha_2 d) \\ B^{(2)} + B^{(1)} \exp(-2\alpha_1 d) = C^{(1)} \exp(-d(\alpha_1 + \alpha_2)) \end{cases}$$

On cherche à avoir $C^{(1)}$ en fonction de $A^{(1)}$. En remplace $B^{(1)}$ et $B^{(2)}$ par (a) et (b) :

$$\frac{1}{2}\left[1 + \frac{\alpha_0 \epsilon_{2,.\|}}{\alpha_1}\right] A^{(1)} + \frac{1}{2}\left[1 - \frac{\alpha_0 \epsilon_{2,.\|}}{\alpha_1}\right] \exp(-2\alpha_1 d) A^{(1)} = C^{(1)} \exp(-d(\alpha_1 + \alpha_2))$$

On trouve :

$$\begin{cases} C^{(1)} = \exp(\alpha_2 d)\left[\cosh(\alpha_1 d) + \dfrac{\alpha_1}{\alpha_0 \epsilon_{2,.\|}} \sinh(\alpha_1 d)\right] A^{(1)} \\ B^{(2)} = \dfrac{1}{2}\left[1 + \dfrac{\alpha_0 \epsilon_{2,.\|}}{\alpha_1}\right] A^{(1)} \\ B^{(1)} = \dfrac{1}{2}\left[1 - \dfrac{\alpha_0 \epsilon_{2,.\|}}{\alpha_1}\right] A^{(1)} \end{cases}$$

En remplaçant z par $z = 0$ (interface Air/AlN) et $z = -d$ (interface AlN/Al_2O_3) dans les solutions des équations de Maxwell (***Eq.4.1***) et (***Eq.4.2***) pour chaque couche, on trouve $B^{(1)}, B^{(2)} et\ C^{(1)}$ en fonction de $A^{(1)}$. Avec d : L'épaisseur du film d'AlN

À l'interface (Air/Film) : $z = 0$

$$\begin{cases} H_{1,y}(0) = H_{2,y}(0) & (5.1) \\ A^{(1)}\dfrac{\omega\epsilon_1}{ic\alpha_0} = \dfrac{\omega\epsilon_{2,\perp}}{ic\alpha_1}\left[B^{(1)} - B^{(2)}\right] & (5.2) \\ A^{(1)} = \dfrac{\alpha_0\epsilon_{2,\perp}}{\alpha_1\epsilon_1}\left(B^{(1)} - B^{(2)}\right) & (5.3) \end{cases}$$

$$\begin{cases} E_{1,x}(0) = E_{2,x}(0) & (5.4) \\ A^{(1)} = B^{(1)} + B^{(2)} & (5.5) \\ B^{(1)} + B^{(2)} = \dfrac{\alpha_0\epsilon_{2,\perp}}{\alpha_{1\epsilon_1}}\left(B^{(1)} - B^{(2)}\right) & (5.6) \end{cases}$$

$$\boxed{B^{(2)}\left(1 + \frac{\alpha_0\epsilon_{2,\perp}}{\alpha_1\epsilon_1}\right) = -B^{(1)}\left(1 - \frac{\alpha_0\epsilon_{2,\perp}}{\alpha_1\epsilon_1}\right)} \quad (5.7)$$

À l'interface (Film/Substrat) : $z = d$

$$\begin{cases} H_{2,y}(d) = H_{3,y}(d) \ (6.1) \\ \dfrac{\omega\epsilon_{2,\perp}}{ic\alpha_1}\left[B^{(1)}\exp(\alpha_1 d) - B^{(2)}\exp(-\alpha_1 d)\right] = -C^{(1)}\dfrac{\omega\epsilon_{3.\perp}}{ic\alpha_2}\exp(\alpha_2 d) \ (6.2) \\ C^{(1)} = -\dfrac{\alpha_2\epsilon_{2,\perp}}{\alpha_1\epsilon_{3.\perp}}\left[B^{(1)}\exp(\alpha_1 d) - B^{(2)}\exp(-\alpha_1 d)\right]\exp(-\alpha_2 d) \ (6.3) \end{cases}$$

$$\begin{cases} E_{2,x}(d) = E_{3,x}(d) & (6.4) \\ B^{(1)}\exp(\alpha_1 d) + B^{(2)}\exp(-\alpha_1 d) = C^{(1)}\exp(\alpha_2 d) & (6.5) \\ B^{(1)}\exp(\alpha_1 d) + B^{(2)}\exp(-\alpha_1 d) = -\dfrac{\alpha_2\epsilon_{2,\perp}}{\alpha_1\epsilon_{3.\perp}}\left[B^{(1)}\exp(\alpha_1 d) - B^{(2)}\exp(-\alpha_1 d)\right]\exp(-\alpha_2 d)\exp(\alpha_2 d) & (6.6) \end{cases}$$

$$B^{(1)}\left(1 + \frac{\alpha_2\epsilon_{2,\perp}}{\alpha_1\epsilon_{3.\perp}}\right)\exp(\alpha_1 d) = -B^{(2)}\left(1 - \frac{\alpha_2\epsilon_{2,\perp}}{\alpha_1\epsilon_{3.\perp}}\right)\exp(-\alpha_1 d) \quad (6.7)$$

$$\boxed{B^{(2)}\left(1 - \frac{\alpha_2\epsilon_{2,\perp}}{\alpha_1\epsilon_{3.\perp}}\right) = -B^{(1)}\left(1 + \frac{\alpha_2\epsilon_{2,\perp}}{\alpha_1\epsilon_{3.\perp}}\right)\exp(2\alpha_1 d)} \quad (6.8)$$

À partir de (5.7) et (6.8) :

$$\begin{cases} B^{(2)}\left(1 + \dfrac{\alpha_0\epsilon_{2,\perp}}{\alpha_1\epsilon_1}\right) = -B^{(1)}\left(1 - \dfrac{\alpha_0\epsilon_{2,\perp}}{\alpha_1\epsilon_1}\right) \\ B^{(2)}\left(1 - \dfrac{\alpha_2\epsilon_{2,\perp}}{\alpha_1\epsilon_{3.\perp}}\right) = -B^{(1)}\left(1 + \dfrac{\alpha_2\epsilon_{2,\perp}}{\alpha_1\epsilon_{3.\perp}}\right)\exp(2\alpha_1 d) \end{cases}$$

On en déduit la relation de dispersion :

$$-B^{(1)}\left(1 - \frac{\alpha_0\epsilon_{2,\perp}}{\alpha_1\epsilon_1}\right)\left(1 - \frac{\alpha_2\epsilon_{2,\perp}}{\alpha_1\epsilon_{3.\perp}}\right) = -B^{(1)}\exp(2\alpha_1 d)\left(1 + \frac{\alpha_0\epsilon_{2,\perp}}{\alpha_1\epsilon_1}\right)\left(1 + \frac{\alpha_2\epsilon_{2,\perp}}{\alpha_1\epsilon_{3.\perp}}\right)$$

$$\boxed{\left(1 + \frac{\alpha_0\epsilon_{2,\perp}}{\alpha_1\epsilon_1}\right)\left(1 + \frac{\alpha_2\epsilon_{2,\perp}}{\alpha_1\epsilon_{3.\perp}}\right) - \exp(-2\alpha_1 d)\left(1 - \frac{\alpha_0\epsilon_{2,\perp}}{\alpha_1\epsilon_1}\right)\left(1 - \frac{\alpha_2\epsilon_{2,\perp}}{\alpha_1\epsilon_{3.\perp}}\right) = 0}$$

ANNEXE C (échantillons retenus)

Détails sue les échantillons étudiés :

- Echantillon JAP : AlN/Al_2O_3 (Epitaxie MOCVD)

	Epaisseur de AlN d(µm)
Expérimentale	0.72
Théorie (épaisseur optique)	1

- Echantillon PVD28 : AlN/Si(001) (Pulvérisation magnéton)

	Epaisseur de AlN d(µm)
Expérimentale	4.3
Théorie (épaisseur optique)	4.5

- Echantillon PT263 : $AlN/Pt/Al_2O_3$ (Pulvérisation magnéton) ; Pt/ Al_2O_3 (épitaxie)

	Epaisseur de AlN d(µm)
Expérimentale	2.3
Théorie (épaisseur optique)	2

- Echantillon TiNAlN : AlN/TiN/Si(100)

	Epaisseur de AlN d(µm)
Expérimentale	2.4
Théorie (épaisseur optique)	2.8